



Approches multi-échelles des composites granulaires avec effets d'interface : applications aux nanocomposites et composites cimentaires

Maged Sidhom

► To cite this version:

Maged Sidhom. Approches multi-échelles des composites granulaires avec effets d'interface : applications aux nanocomposites et composites cimentaires. Autre. Université Paris-Est, 2014. Français. NNT : 2014PEST1175 . tel-01167116

HAL Id: tel-01167116

<https://pastel.archives-ouvertes.fr/tel-01167116>

Submitted on 23 Jun 2015

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Pôle de recherche et d'enseignement supérieur

École Doctorale SIE

THÈSE

présentée pour l'obtention du diplôme de

DOCTEUR

de l'Université PARIS-EST

Spécialité : Structures et Matériaux

par

Maged SIDHOM

intitulée

**Approches multi-échelles des composites granulaires
avec effets d'interface : application aux nanocomposites
et matériaux cimentaires**

soutenue à Champs-sur-Marne le 8 décembre 2014

devant le jury composé de :

Rapporteurs :	Djimédo KONDO	Université Pierre et Marie Curie
	Albert GIRAUD	Université de Lorraine
Examineurs :	Gilles CHANVILLARD	Lafarge Centre de Recherche
	Jean-François BARTHELEMY	CEREMA
	Julien SANAHUJA	EDF R&D
Directeur :	Luc DORMIEUX	Ecole Nationale des Ponts et Chaussées

« Tous ceux qui croisent ta route ont quelque chose à
t'apprendre. »

à Oumeima,

à mes parents,

à mon frère et ma sœur

Remerciements

Cette thèse a démarré suite à mon stage de Master de recherche encadré par Karim Miled et Oualid Limam. Je leur avais fait part de ma volonté de faire une thèse et ils ont trouvé naturel de me recommander à Karam Sab, directeur du laboratoire Navier de l'Ecole des Ponts et Chaussées. Karam m'avait accueilli pour un "stage pré-doctoral", sous sa direction et celle de Luc Dormieux, qui a débouché sur mon recrutement en thèse. Quelques trois ans plus tard, je tiens à remercier tous les acteurs de cette thèse.

Je souhaite remercier en premier lieu les professeurs Djimédo Kondo et Albert Giraud d'avoir accepté d'évaluer mon travail en rapportant mon mémoire et en assistant à ma soutenance de thèse. Leurs critiques et leurs remarques constructives m'ont permis d'améliorer et de clarifier certains points de ce travail. Je tiens également à remercier Gilles Chanvillard (pour le suivi de mes travaux, pour l'accueil au sein du LCR Lafarge et pour les idées qu'il m'a proposé pour valider et compléter mon travail), Jean-François Barthélémy (pour son aide sur les méthodes numériques développées dans ce travail et la relecture de mon mémoire) et Julien Sanahuja (pour avoir relu en détail mon mémoire et pour les corrections proposées). Je les remercie tous les trois d'avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse.

Je voudrais ensuite exprimer ma gratitude à mon directeur de thèse Luc Dormieux, dont la patience, la rigueur scientifique et l'expérience en matière d'encadrement ont permis de mener à terme ce travail de recherche. Ses compétences théoriques et sa force de proposition ont permis de nous sortir de plusieurs difficultés techniques. Il a su équilibrer entre exigences en matière de résultats industriellement exploitables et objectifs académiques et scientifiquement novateurs de cette thèse.

Je remercie également tous les collègues de l'équipe multi-échelle du laboratoire Navier pour l'ambiance chaleureuse qui y règne. Je tiens à remercier particulièrement Ghazi (pour son soutien de compatriote), Patrick (pour toutes les visions politiques et sociale qu'on partageait), Denis, Camille et Eric. Je les remercie pour leurs conseils, leur patience et

surtout pour les discussions et les débats "purement scientifiques" (ou pas) qui animaient nos repas et nos pauses café. Je voudrais également remercier Marie et Rachida pour leur aide précieuse sur des questions administratives.

Je tiens également à remercier mes amis doctorants et post-doctorants qui ont partagé mon quotidien et supporté mes plaisanteries et mes théories infondées pendant ces trois ans de thèse : Jérémie, François, Maxime, Mathilde, Yassine, Minh Tuan, Thomas, Alexandre, Camille, Abdessamad, Ababaccar, Dac Loi et Linlin.

Pour finir, j'adresse un grand merci à mes parents qui m'ont encouragé à me lancer dans une thèse et à Oumeïma qui a su me soutenir et rester à mes côtés pendant les hauts et les bas.

Table des matières

1	Etat de l'art sur les matériaux composites avec effets d'interface	5
1.1	Introduction	6
1.2	Effets d'interface dans les matériaux composites	6
1.2.1	Interphases ou couches périphériques	7
1.2.2	Interfaces de discontinuité de contrainte	8
1.2.3	Interfaces de discontinuité de déformation	8
1.3	Modélisation des effets d'interface en micromécanique	9
1.3.1	Modélisation en élasticité	9
1.3.2	Modélisation en rupture	15
1.4	Matériaux modèles présentant des effets d'interfaces	17
1.4.1	Nanocomposites	17
1.4.2	Pâtes de ciment et gel de C-S-H	18
1.5	conclusion	21
2	Comportement élastique et poroélastique des nanocomposites	23
2.1	Introduction	24
2.2	Nanocomposites et effets d'interface	25
2.3	Modélisation de l'effet d'interface	26
2.3.1	Modèles 2D et 3D de l'effet d'interface	27
2.3.2	Comportement élastique de l'interface	29
2.3.3	Interfaces intergranulaires et grains composites	32
2.4	Une extension du schéma auto-cohérent	33
2.4.1	Pore sphérique entouré d'une matrice infinie	34

2.4.2	Inclusion composite entourée par une matrice infinie	35
2.4.3	Obtention de la rigidité homogénéisée	38
2.5	Implémentation du schéma auto-cohérent avec effets d'interface	40
2.5.1	Modules élastiques du milieu homogénéisé	40
2.5.2	Développements en séries de la solution	42
2.6	Matériau nanoporeux saturé	44
2.6.1	Schéma auto-cohérent en nanoporomécanique	45
2.7	Conclusion	49
3	Comportement élastique des matériaux granulaires avec inclusions allongées et effets d'interface : cas des gels de C-S-H	51
3.1	Introduction	52
3.2	Composite granulaire à inclusions sphériques et effets d'interface	53
3.2.1	Modèle élastique existant pour le cas sphérique	53
3.2.2	Approches énergétiques de la notion d'inclusion équivalente	55
3.2.3	Comparaison et validation des approches	61
3.3	Composite granulaire à inclusions ellipsoïdales allongées et effets d'interface	70
3.3.1	Considérations géométriques	70
3.3.2	Approches énergétiques donnant des inclusions équivalentes	72
3.3.3	Comparaison des approches dans le cas ellipsoïdal	75
3.3.4	Modules homogénéisées du matériau granulaire à inclusions ellipsoïdales et effets d'interface : cas du gel de C-S-H	76
3.4	Conclusion	82
4	Rupture fragile des matériaux granulaires à inclusions allongées sous effets d'interface : cas des gels de C-S-H	85
4.1	Introduction	87
4.2	Critères de rupture locaux dans les interfaces	88
4.3	Méthode de changement d'échelle	88
4.4	Méthodes de calcul pour la mise en œuvre de la méthode de changement d'échelle	92

4.4.1	Méthode semi-numérique : différentiation du schéma auto-cohérent	93
4.4.2	Méthode de calcul direct avec « isotropisation » pour le calcul des tenseurs de Hill	99
4.4.3	Méthode analytique basée sur un schéma dilué généralisé	101
4.5	Comparaison des méthodes - Détermination des critères homogénéisés . .	105
4.5.1	Comparaison sur les termes recherchés	106
4.5.2	Critères homogénéisés	108
4.6	Critère 3D et dépendance du troisième invariant : une ébauche	113
4.7	Conclusion	121
5	Modèles de rupture de la pâte de ciment - Validation par données expérimentales	123
5.1	Introduction	125
5.2	Microstructure et évolution des propriétés mécaniques de la pâte de ciment	126
5.3	Modélisation micromécanique de la pâte de ciment	128
5.3.1	Modèle de Mori-Tanaka en rupture fragile	129
5.3.2	Modèle auto-cohérent en rupture fragile	132
5.3.3	Modèle de Mori-Tanaka en rupture ductile	134
5.4	Données expérimentales sur les pâtes de ciment	137
5.5	Validation et calage des modèles de ruptures de la pâtes par données expérimentales	139
5.5.1	Paramètres de calage	140
5.5.2	Calage des modèles dans le cas d'une porosité séparée	141
5.5.3	Calage des modèles dans le cas où la porosité totale est placée dans le gel	145
5.6	Conclusion	163
A	Expressions analytiques obtenues dans le chapitre 1	171
A.1	Coefficients de l'équation déviatorique (2.59)	171

A.2 Comportement de la solution pour les grandes valeurs de κ - Coefficients de l'équation 2.62	172
Bibliographie	173

Introduction générale

Un large spectre de matériaux industriels (bétons, ciments, alliages...) ou naturels (sols, argiles, bois...) peuvent être qualifiés de composites ou de matériaux hétérogènes (matériaux regroupant des phases de propriétés différentes, y compris des vides). Ces matériaux peuvent être classés, selon leurs configurations macro et micro structurales, en composites périodiques (composites tissés, plaques trouées périodiquement...) ou composites aléatoires issus d'un mélange non ordonné de constituants ou de phases formées naturellement (argiles, ciments, plâtres, sols...). Le comportement et les performances mécaniques de ces composites dépendent fortement des variantes microstructurales aux différentes échelles de la matière. En conséquence, la compréhension des relations microstructure-propriétés et leur modélisation ouvrent la voie au développement et au contrôle des procédés et méthodes d'élaboration de configurations microstructurales optimales favorisant l'émergence de composites de très hautes performances, répondant au mieux aux exigences des conditions d'utilisation. C'est dans ce cadre que s'inscrivent les travaux de cette thèse visant la contribution au développement des approches micromécaniques pour les composites granulaires avec effets d'interface en vue de leurs applications aux nanocomposites et aux matériaux cimentaires, qui présentent un grand intérêt pour l'industrie du bâtiment. En effet pour les industriels de ce secteur, caractériser les matériaux cimentaires, en déduire leurs propriétés mécaniques et, encore mieux, pouvoir les prédire avec précision est devenu un besoin crucial. Ceci passe nécessairement par le développement de modèles mécaniques (ou micro-mécaniques) qui se basent sur des observations microscopiques (M.E.B, M.E.T) de la microstructure et sur des ou-

tils de caractérisation (XRD, micro-tomographie, micro/nano-indentation) pour prédire les propriétés d'élasticité (ou poroélasticité) et de rupture des matériaux composites. On retrouve dans la littérature [Mori and Tanaka, 1973, Kroener, 1978, Hashin, 1991] un grand nombre de modèles pouvant être qualifiés de micromécaniques ou multi-échelles (car ils se basent sur des propriétés et des observations à une échelle inférieure pour déterminer des propriétés à une échelle supérieure) pouvant s'appliquer aux composites aléatoires. Parmi ces modèles on recense les modèles numériques basés sur la méthode des éléments finis (E.F) [Pierard et al., 2007b, Pierard et al., 2007a], ceux basés sur la transformée de Fourier rapide (F.F.T) [Brisard, 2011] et les modèles de champs moyen utilisant souvent la solution d'Eshelby ou les approches variationnelles (schémas de Mori-Tanaka ou auto-cohérent, bornes de Voigt et Reuss ou de Hashin-Shtrikman). Ces modèles du premier ou du deuxième type présentent, malgré leur utilisation fréquente, des limitations pouvant affecter sérieusement leur aptitude prévisionnelle, notamment lorsqu'il s'agit de déterminer le comportement en rupture des matériaux composites granulaires. Ces limitations concernent l'effet d'interface et l'effet de taille (interdépendants) que les modèles classiques répandus dans la littérature ne prennent pas en compte, en dépit de la confirmation de leurs rôles par un certain nombre d'auteurs [Shuttleworth, 1950, Mura and Furuhashi, 1984, Shiotz et al., 1998] qui ont tenté d'intégrer, parfois avec succès, plusieurs types d'interfaces dans des modèles micromécaniques d'élasticité et de rupture. Cependant, ces tentatives demeurent limitées aux composites (granulaires ou à matrice) avec des formes d'inclusions simples, sphériques ou bien cylindriques et ceci en dépit des données de la littérature [Sanahuja, 2008, Sanahuja et al., 2008] qui révèlent l'importance de la forme des inclusions et son influence sur les propriétés mécaniques de ces matériaux. Il se crée alors le besoin de développement de modèles pour composites à inclusions de formes plus générales intégrant les effets d'interfaces pour pallier ces carences de la littérature et pour doter les utilisateurs de ces matériaux d'outils prévisionnels plus sûrs pour leurs projets de conception. Pour répondre à ce besoin, on a adopté une démarche qui tire profit des données de la littérature pour intégrer les effets des divers types d'interface (de discontinuités de contrainte ou de déplacement) à des formes

d'inclusions (sphériques et ellipsoïdales) dans des modèles micromécaniques (basés sur les méthodes d'homogénéisation) de comportement élastique, poroélastique et de rupture des matériaux composites. Des données expérimentales relatives au gel de C-S-H, fournies par Le centre de recherche du groupe Lafarge ont été mises à profit pour la validation des modèles de rupture inter-granulaire développés dans le cadre de cette étude. Les résultats obtenus dans ce travail et les discussions associées sont présentés dans cinq chapitres :

- Le chapitre 1 est consacré à une analyse des données bibliographiques relatives aux effets d'interfaces et aux formes d'inclusions dans les composites granulaires et nanocomposites ainsi qu'aux modèles d'élasticité et de rupture les considérant.
- Le chapitre 2 est consacré à l'intégration des effets d'interface de discontinuité de contrainte dans un modèle micromécanique pour rendre compte du comportement élastique et poroélastique des matériaux granulaires à inclusions sphériques.
- Le chapitre 3 est consacré au développement des approches énergétiques permettant de considérer les effets d'interfaces dans des inclusions ellipsoïdales pour rendre compte du comportement élastique effectif d'un matériau granulaire à inclusions élancées susceptibles de présenter des effets d'interface de discontinuité de déplacement (gel de C-S-H).
- Le chapitre 4 est consacré à l'étude de la rupture fragile, des mêmes types de matériaux, produite par un glissement entre les grains, au niveau des interfaces. Outre la définition d'un critère de rupture dans les interfaces pour ces matériaux (dont la rupture est généralement admise dans les grains faute de solutions techniques), il a été question d'étudier la rupture anisotrope paramétrée par les orientations de grains.
- Le chapitre 5 conclut ce travail par la mise au point de modèles de rupture pour la pâte de ciment durcie, intégrant le modèle de rupture inter-granulaire du gel de C-S-H (hydrate principal de la pâte de ciment). Ils sont confrontés à des résultats expérimentaux obtenus par essais de résistance à la compression sur des pâtes à formulations variées effectués au sein du LCR (Lafarge Centre de Recherche) ce qui permet une évaluation de leurs aptitudes prévisionnelles.

Chapitre 1

Etat de l'art sur les matériaux composites avec effets d'interface

Résumé : *Ce chapitre offre un aperçu sur la littérature des composites aléatoires avec effets d'interface. Il expose les principaux résultats sur la modélisation micromécanique de ces composites en élasticité et en rupture.*

Sommaire

1.1	Introduction	6
1.2	Effets d'interface dans les matériaux composites	6
1.2.1	Interphases ou couches périphériques	7
1.2.2	Interfaces de discontinuité de contrainte	8
1.2.3	Interfaces de discontinuité de déformation	8
1.3	Modélisation des effets d'interface en micromécanique	9
1.3.1	Modélisation en élasticité	9
1.3.2	Modélisation en rupture	15
1.4	Matériaux modèles présentant des effets d'interfaces	17
1.4.1	Nanocomposites	17
1.4.2	Pâtes de ciment et gel de C-S-H	18
1.5	conclusion	21

1.1 Introduction

La modélisation du comportement mécanique des composites aléatoires à l'aide des méthodes multi-échelles a fait l'objet d'un grand nombre de travaux de recherche dont il serait vain de dresser une liste satisfaisante [Eshelby, 1957, Hashin and Shtrikman, 1962, Kroener, 1978, Mori and Tanaka, 1973]. Cependant les modèles dérivant de ces méthodes, devenus d'usage classique, montrent leur limitation lorsqu'ils sont appliqués aux composites présentant des effets de taille d'inclusions ou des effets d'interfaces à leurs bords. La prise en compte de ces derniers est d'une grande importance dans le développement de modèles précis de prédiction des propriétés mécaniques en élasticité comme en rupture. C'est pourquoi, nous accordons dans le cadre de ce chapitre bibliographique, plus d'intérêt aux différentes formes d'effets d'interface rencontrés dans les composites aléatoires à travers l'analyse des données de la littérature s'y rapportant. Pour finir, nous examinons des matériaux composites susceptibles d'exhiber des effets d'interface avec les modélisations qui leurs ont été consacrées dans la littérature.

1.2 Effets d'interface dans les matériaux composites

On retrouve dans la littérature plusieurs formes de modèles micromécaniques qui ont été utilisées pour rendre compte des propriétés mécaniques des composites aléatoires à partir des propriétés des phases existantes, de leurs proportions et de leurs distributions. On peut classer ces modèles en deux types :

- des modèles par champ moyen, basés la plupart sur la solution d'Eshelby [Eshelby, 1957] ; ils peuvent fournir des estimations ou des bornes des propriétés mécaniques (rigidités, modules élastiques, domaines de résistances) sous forme d'expressions analytiques dans les cas les plus simples. Parmi ces modèles on peut citer les plus connus : le modèle de Mori-Tanaka [Mori and Tanaka, 1973], le modèle auto-cohérent [Kroener, 1978], les bornes historiques de Voigt et Reuss, les bornes de Hashin et Shtrikman [Hashin and Shtrikman, 1962].
- des modèles numériques qui sont basés sur une modélisation de la microstructure

du matériau, une discrétisation particulière du milieu gardant séparées les phases et sur l'application de la méthode des éléments finis ou des techniques de FFT (transformation de Fourier rapide). Ces modèles ne donnent que des estimations numériques des propriétés mécaniques. Leur précision dépend de la modélisation fidèle de la microstructure. De plus la reproductibilité des résultats n'est pas toujours assurée.

Ces deux types de modèles tels qu'on les trouve dans la littérature montrent la même limitation ; ils ne prennent pas en compte l'existence d'effets d'interface (même faibles) qui se produisent au niveau des frontières des phases de la majorité des matériaux composites, en dépit de la confirmation de leur existence par plusieurs chercheurs [Theocaris, 1987, Mura and Furuhashi, 1984, Wei and Amnand, 2004, Shiotz et al., 1998]. Les deux types de modèles micromécaniques ci-dessus cités peuvent donner pour des microstructures semblables de bonnes estimations des propriétés mécaniques lorsque l'effet d'interface est faible et de mauvaises estimations lorsque cet effet prend de l'importance. Ces effets d'interfaces sont indépendants des propriétés des phases existantes (ou introduites) dans le matériau composite. Dans la littérature, le comportement de la région de l'interface est simulé par trois modèles traduisant des mécanismes physiques (d'interface) radicalement différents.

1.2.1 Interphases ou couches périphériques

Ce premier type de modélisation décrit la zone de l'interface comme une couche (ou "interphase", généralement mince) tridimensionnelle située entre une inclusion et la matrice ou entre une inclusion et les inclusions avoisinantes. Cette couche peut être créée de manière industrielle dans certains composites (par revêtement) ou se former naturellement dans d'autres comme les bétons ou les ciments pour lesquels l'existence de ces couches (surnommées ITZ ou Interfacial Transition Zone) a été mise en évidence dans plusieurs travaux. Dans tous les cas, les propriétés mécaniques de l'interphase diffèrent de celles de la matrice ou des inclusions du matériau composite. Des conditions de contact parfait sont généralement admises aux frontières interphase/matrice et interphase/inclusion.

1.2.2 Interfaces de discontinuité de contrainte

Le deuxième type d'interface que l'on examine dans ce chapitre est assez différent de la première modélisation au plan de la représentation géométrique. En effet, la zone de l'interface n'est pas considérée comme une couche 3D mais plutôt comme une surface 2D dans laquelle on rencontre un phénomène physique assez particulier (semblable à celui qu'on observe dans le phénomène de capillarité) : l'existence de contraintes surfaciques au niveau des frontières d'inclusions. L'effet de ces contraintes de surface (ou d'interface) a fait, depuis plusieurs années, l'objet d'un certain nombre de travaux de recherche [Shuttleworth, 1950, Gurtin and Murdoch, 1975, Nix and Gao, 1998, Müller and Saúl, 2004, Li et al., 2004] et notamment avec l'apparition et le développement des matériaux nano-structurés qui requiert des modèles mécaniques incorporant ces effets d'interfaces [Cuenot et al., 2004, Duan et al., 2005a, Shenoy, 2005, Dingreville et al., 2005]. Des travaux récents ont permis de revenir en détail sur l'origine physique des contraintes de surface [Müller and Saúl, 2004, Dingreville et al., 2005].

1.2.3 Interfaces de discontinuité de déformation

Le troisième type d'interface que nous reportons dans cette section est caractérisé par une discontinuité locale du champ de déplacement au bord des inclusions. La zone interfaciale est à nouveau décrite comme une surface. Cet effet a été constaté par plusieurs auteurs pour différentes configurations microstructurales [Theocaris, 1987]. Ainsi, [Mura and Furuhashi, 1984] ont observé des glissements aux frontières des grains dans les matériaux granulaires et les polycristaux à température ambiante et les ont interprétés par une décohésion totale des grains au niveau de l'interface. Par contre [Huang et al., 1993] ont cherché à définir un comportement de frottement de l'interface généralisant ainsi l'interface de décohésion définie dans [Mura and Furuhashi, 1984]. De leur côté, [Shiotz et al., 1998, Wei and Amnand, 2004] ont trouvé que le chargement macroscopique de déformation imposé à un matériau polycristallin était repris par des glissements et des séparations au niveau des frontières de grains.

1.3 Modélisation des effets d'interface en micromécanique

Dans cette section nous regroupons de façon non exhaustive les principaux modèles d'élasticité et de rupture sur les matériaux composites intégrant un des trois types d'interfaces de la section 1.2. L'accent a été mis sur l'effet produit par chaque type d'interface sur les propriétés élastiques effectives et la rupture du matériau composite.

1.3.1 Modélisation en élasticité

Les différents phénomènes observés expérimentalement dans les composites granulaires ou à matrice et attribués à l'existence d'interfaces aux frontières des inclusions (dont certains sont reportées en section 1.2) ont incité les chercheurs à concentrer leurs travaux sur la quantification de l'effet d'interface sur les propriétés élastiques effectives des matériaux composites. Dans les deux premiers travaux traitant de la question [Hashin, 1962, Christensen and Lo, 1979], les auteurs parviennent à déterminer les modules élastiques équivalents d'une inclusion sphérique ou cylindrique composite plongée dans une matrice infinie (généralisation du problème d'Eshelby), en employant des champs de déplacement de la forme de [Love, 1944]. Cette inclusion composite est constituée d'un cœur entouré d'une couche périphérique (interphase). Son module de compression équivalent, dans le cas sphérique, est donc donné naturellement en fonction des modules du cœur et de la couche sous une expression assez simple (1.1) [Hashin, 1962]. En revanche son module de cisaillement équivalent, toujours pour la forme sphérique, dépend en plus des modules de la matrice infinie. Il est donné comme solution d'une équation du second degré dont les coefficients A, B, D sont retrouvés dans [Christensen and Lo, 1979, Hervé and Zaoui, 1990] :

$$k_{eq} = k_0 = k_2 + \frac{c(k_1 - k_2)(3k_2 + 4\mu_2)}{3c(k_2 - k_1) + 3k_1 + 4\mu_2} \quad (1.1)$$

$$\left(\frac{\mu_{eq}}{\mu_2}\right)^2 A + \left(\frac{\mu_{eq}}{\mu_2}\right) B + D = 0$$

où k_1 , μ_1 sont les modules du cœur k_2 , μ_2 les modules de la couche, c la fraction volumique du cœur dans l'inclusion composite.

Quelques années après, [Herve and Zaoui, 1993] ont réussi à généraliser ce raisonnement à une inclusion sphérique constituée d'un cœur et n couches périphériques concentriques et à déterminer les modules équivalents d'une telle inclusion plongée dans une matrice infinie.

Ainsi la problématique d'inclusions sphériques (ou cylindriques) entourées d'interphases est bien traitée dans la littérature. On retrouve, en revanche, très peu de travaux sur des formes d'inclusion plus générales, ellipsoïdales par exemple.[Duan et al., 2005b]

En ce qui concerne, les interfaces de discontinuité de déplacement, leur intégration dans des modèles d'élasticité a commencé, à notre connaissance, avec [Mura and Furuhashi, 1984] qui ont étudié des inclusions sphériques avec une décohésion complète. Ensuite Hashin a présenté dans [Hashin, 1991] la solution en contrainte et en déformation microscopiques du problème d'Eshelby avec une inclusion sphérique avec interface, en associant à l'interface une certaine rigidité, telle qu'on la retrouve dans des travaux plus récents. [Dormieux et al., 2007, Sanahuja, 2008] ont proposé des expressions des modules homogénéisés (auto-cohérents) k_{ac} et μ_{ac} de matériaux composites poreux incorporant ce type d'effet d'interfaces au bords d'inclusions sphériques. Ces auteurs les ont présenté pour le cas particulier où le cœur et l'interface sont incompressibles, mais la méthode exposée permet de les obtenir dans le cas général :

$$k_{ac} = \frac{4(1 - \phi)\mu_{ac}}{3\phi} \quad (1.2)$$

μ_{ac} est donné comme solution de l'équation suivante :

$$16(5 + \kappa)(3 - \phi)M^2 + [(9 + 77\phi)\kappa + 114(3\phi - 1)]M + 57\kappa(2\phi - 1) = 0 \quad (1.3)$$

où $M = \mu_{ac}/\mu_0$ et $\kappa = 2K_t r/\mu_0$. ϕ représente la porosité du matériau, μ_0 le module de cisaillement du cœur des inclusions solides, r leur rayon et K_t le module tangentiel de l'interface.

Les travaux modélisant ces effets d'interfaces dans des modèles élastiques ont notamment

permis de confirmer que les modules équivalents ou les modules homogénéisés étaient affaiblis par l'existence de ces interfaces [Sanahuja, 2008] et de quantifier cet effet. En effet, la représentation du module de compression auto-cohérent (dans le cas général) d'un matériau poreux incorporant cet effet d'interface, en fonction du module K_t permet de rendre compte de cet affaiblissement (figure 1.1). On constate alors que le module de compression k_{sc} incorporant l'effet d'interface ne retrouve la valeur classique de l'estimation auto-cohérente que lorsque les modules d'interfaces tendent vers l'infini. Autrement, ce module de compression reste toujours inférieur à l'estimation auto-cohérente classique (figure 1.1). Les interfaces de discontinuité de contraintes n'ont pas été aussi largement

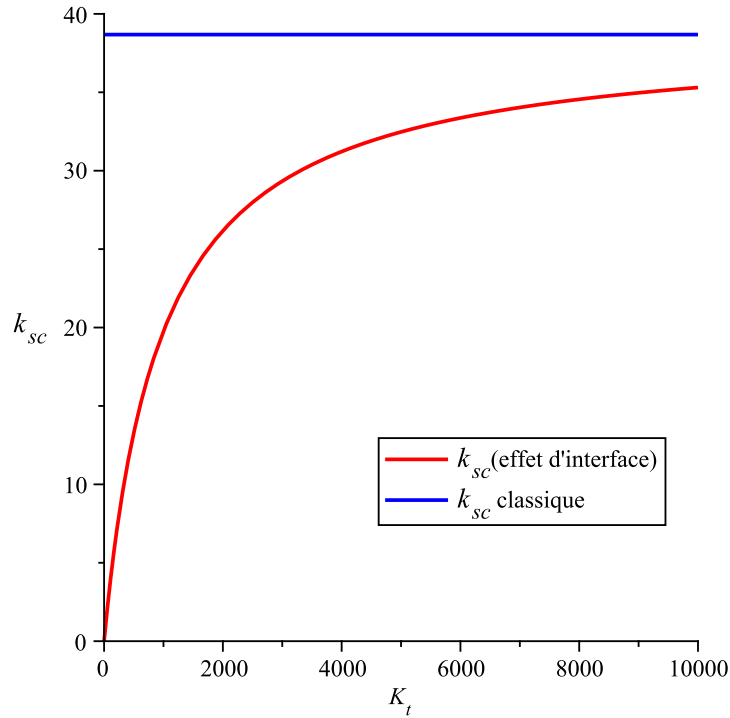


FIGURE 1.1 – Module de compression homogénéisé d'un composite granulaire à inclusions sphériques présentant des interfaces de discontinuité de déplacement - $k_0 = 25$, $\mu_0 = 12$, $r = 0.1$, $\phi = 0.15$, $K_n = K_t$

traitées dans la littérature. En effet, en dépit des recherches datant de 1950 permettant de rendre compte de leur existence [Shuttleworth, 1950, Gurtin and Murdoch, 1975], l'un des premiers travaux les considérant dans des modèles micromécaniques élastiques sont

ceux de [Duan et al., 2005a] qui parviennent à les intégrer dans les schémas d'homogénéisation de Mori-Tanaka et auto-cohérent pour en sortir des estimation des modules homogénéisés d'un matériau à inclusions sphériques. Les principaux résultats de cette étude sont les expressions analytiques de ces modules homogénéisés dont nous reportons le module de compression, donnée à la fois par le schéma auto-cohérent et celui de Mori-Tanaka (se reporter à [Duan et al., 2005a] pour les expressions assez lourdes du module de cisaillement homogénéisé) :

$$\frac{(3k_1(3k_2 + 4f\mu_2) + 2\mu_2[4f\mu_2k_s^r + 3k_2(2 - 2f + k_s^r)])}{3[3(1 - f)k_1 + 3fk_2 + 2\mu_2(2 + k_s^r - fk_s^r)]} \quad (1.4)$$

où k_i et μ_i les modules de la phase inclusionnaire ($i = 1$) et de la phase matricielle ($i = 2$) et $k_s^r = 2k_s/(r\mu_2)$ où $k_s = \lambda_s + \mu_s$ le module de compression de l'interface, r le rayon des inclusions et f la fraction volumique d'inclusions.

[Quang and He, 2008] parviennent par la suite à appliquer les approches variationnelles de Voigt et Reuss pour déterminer des bornes aux modules homogénéisés d'un composite à matrice présentant des interfaces de discontinuité de contrainte au bord de ses inclusions sphériques (le cas d'inclusions cylindriques est également examiné dans [Quang and He, 2008]) :

$$\begin{cases} k_{(+)} = c_0k_0 + \sum_{i=1}^p c_i \left(k_i + \frac{4}{3} \frac{k_{si}}{r_i} \right) \\ \mu_{(+)} = c_0\mu_0 + \sum_{i=1}^p c_i \left(\mu_i + \frac{k_{si} + 6\mu_{si}}{5r_i} \right) \end{cases}$$

$$\begin{cases} k_{(-)} = \left[\frac{c_0}{k_0} + \sum_{i=1}^p \frac{c_i}{k_i + \frac{4k_{si}}{3r_i}} \right]^{-1} \\ \mu_{(-)} = \left[\frac{c_0}{\mu_0} + \sum_{i=1}^p \frac{c_i r_i [\mu_i r_i (285k_i + 20\mu_i) + (48k_i + 136\mu_i)(6k_{si} + \mu_{si})]}{5f(k_i, \mu_i, k_{si}, \mu_{si}, r_i)} \right]^{-1} \end{cases} \quad (1.5)$$

avec

$$f(k_i, \mu_i, k_{si}, \mu_{si}, r_i) = k_{si}\mu_{si}$$

où c_i la fraction de la phase inclusionnaire i , k_i et μ_i ses modules élastiques, r_i le rayon de ses inclusions, c_0 la fraction volumique de la matrice, k_0 et μ_0 ses modules élastiques

et k_{si} et μ_{si} les modules élastiques des interfaces entourant les inclusions de la phase i . Ces modules d'interface interviennent dans l'expression du tenseur de rigidité d'interface qui est défini dans [Quang and He, 2008] par l'expression (1.6) :

$$\mathbb{L}^{(si)} = k_{si}\mathbf{P} \otimes \mathbf{P} + 2\mu_{si}(\mathbb{T} - \frac{1}{2}\mathbf{P} \otimes \mathbf{P}) \quad (1.6)$$

\mathbf{P} étant le tenseur de projection tangentiel d'ordre 2 exprimé en fonction du tenseur de projection normal \mathbf{N} et du tenseur identité \mathbf{I} d'ordre 2 :

$$\mathbf{P} = \mathbf{I} - \mathbf{N} = \mathbf{I} - \underline{n} \otimes \underline{n} \quad (1.7)$$

où \underline{n} est le vecteur normal à l'interface. \mathbb{T} est un tenseur de projection d'ordre 4. Il s'exprime en fonction du tenseur \mathbf{P} à l'aide de l'expression suivante [Quang and He, 2008] :

$$\mathbb{T} = \mathbf{P} \underline{\otimes} \mathbf{P} \quad (1.8)$$

où le produit $\mathbf{A} \underline{\otimes} \mathbf{B}$ désigne un produit tensoriel symétrisé défini par $(\mathbf{A} \underline{\otimes} \mathbf{B})_{ijkl} = (A_{ik}B_{jl} + A_{il}B_{jk})/2$ pour tout \mathbf{A} et \mathbf{B} tenseurs d'ordre 2.

Dans le même contexte, [Brisard et al., 2010a, Brisard et al., 2010b] appliquent également des approches variationnelles pour déterminer des bornes inférieures de Hashin-Shtrickman des modules homogénéisés d'un tel matériau dont nous ne présentons que l'expression pour le module de compression homogénéisé (voir [Brisard et al., 2010b] pour le module de cisaillement) :

$$k = k_m + \frac{f(3k_m + 4\mu_m)(k_p - k_m)}{3fk_m + 4\mu_m + 3(1-f)k_p} \quad (1.9)$$

où $k_p = k_{inc} + \frac{4k_s}{3r}$, k_{inc} , k_m , k_s étant respectivement les modules de compression des inclusions, de la matrice et des interfaces, μ_m le module de cisaillement de la matrice, r le rayon des inclusions et f leur fraction volumique.

Il nous est possible, à ce stade, de comparer les modèles de [Duan et al., 2005a], cités par Quang08 et [Brisard et al., 2010a] en ce qui concerne la prédiction du module de compression homogénéisé d'un composite à matrice avec inclusions sphériques présentant cet

effet d'interface de discontinuité de contrainte. Nous traçons en figure 1.2 les différentes estimations de ce module homogénéisé en fonction du module d'interface k_s pour des valeurs fixées des autres paramètres. Cette comparaison nous permet tout d'abord de constater que cet effet d'interface produit une augmentation des modules élastiques effectifs du composite (par rapport au cas sans interfaces). En effet, lorsque le module d'interface k_s est nul (effet d'interface inexistant) les modèles donnent une valeur du module de compression homogénéisé proche de l'estimation classique de Mori-Tanaka. Les modèles de [Duan et al., 2005a] et [Brisard et al., 2010a] permettent d'en retrouver la valeur exacte. En revanche, à partir d'une certaine valeur strictement positive de k_s tous les modèles donnent une valeur plus élevée que l'estimation classique de Mori-Tanaka. Ensuite, on remarque que la borne de Hashin-Shtrikman généralisée par [Brisard et al., 2010a] (borne inférieure du module de compression) coïncide parfaitement avec l'estimation de Mori-Tanaka étendue par [Duan et al., 2005a] pour prendre compte des effets d'interfaces. Pour résumer, on peut constater qu'un grand nombre de publications a permis d'introduire les trois concepts d'interfaces dans des modèles micromécaniques permettant de prédire le comportement élastique de composites à microstructures variées. Ces interfaces ont été généralement considérées dans le cas d'inclusions de formes simples, sphériques ou cylindriques, pour simplifier les développements analytiques. Très peu de travaux intégrant les effets d'interfaces à des inclusions de forme plus générale (sphéroïdale) sont disponibles dans la littérature. Pourtant de récentes recherches ont permis d'affirmer l'importante influence de la forme des inclusions sur les propriétés élastiques [Sanahuja, 2008] notamment pour les matériaux granulaires. La figure 1.3 permet d'en rendre compte ; elle présente le module de Young et le coefficient de Poisson homogénéisés d'un composite granulaire poreux déterminés par un schéma auto-cohérent en fonction de la porosité pour différents rapports d'aspect de ses inclusions ellipsoïdales. L'écart entre les modules obtenus avec les différents rapports d'aspects r_s montre clairement l'importance de la forme des inclusions. Dans le chapitre 3 de ce manuscrit, nous explorons la possibilité d'intégrer des interfaces de discontinuité de déplacement à des inclusions de forme ellipsoïdales, pour étudier les propriétés élastiques d'un composite présentant une telle forme d'inclusions.

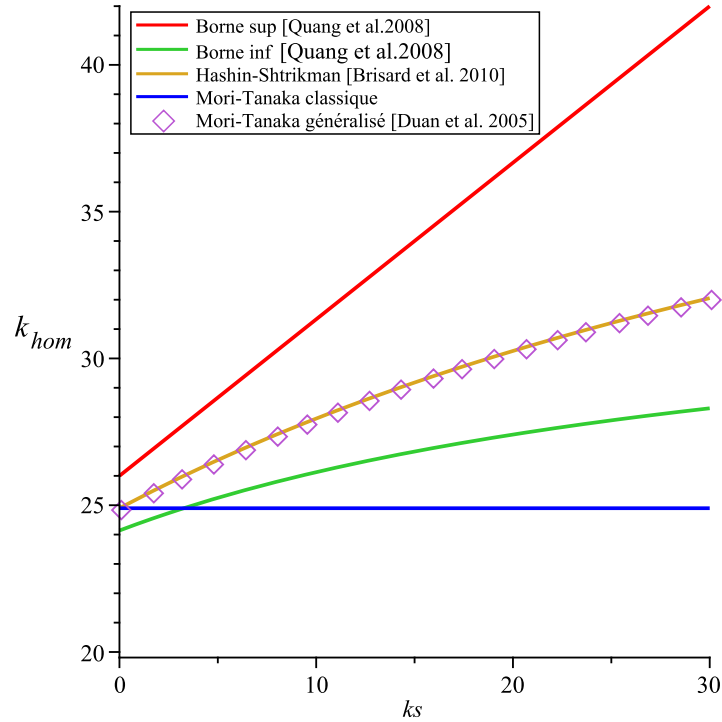


FIGURE 1.2 – Module de compression homogénéisé d'un composite à matrice et inclusions sphériques présentant des interfaces de discontinuité de contrainte - Estimation par différents modèles de la littérature - $k_m = 20$, $k_{inc} = 35$, $\mu_m = 15$, $r = 1$, $f = 0.4$

1.3.2 Modélisation en rupture

Dans cette section nous passons en revue les principaux modèles de rupture impliquant des mécanismes d'interface que l'on peut rencontrer dans la littérature.

Plusieurs études ont été consacrées aux effets d'interface sur les propriétés élastiques des composites, mais également à leurs effets sur les mécanismes de rupture et la résistance des matériaux. En ce qui concerne les interfaces de discontinuité de déplacement, on peut citer les travaux de [Dormieux et al., 2007] qui, après détermination des propriétés élastiques d'un matériau granulaire poreux présentant des interfaces de discontinuité de déplacement, ont utilisé ces résultats pour explorer la rupture produite par un glissement inter-granulaire. Pour cela, les auteurs ont postulé un critère de Von Mises dans les interfaces, portant sur la composante tangentielle du vecteur contrainte au niveau de

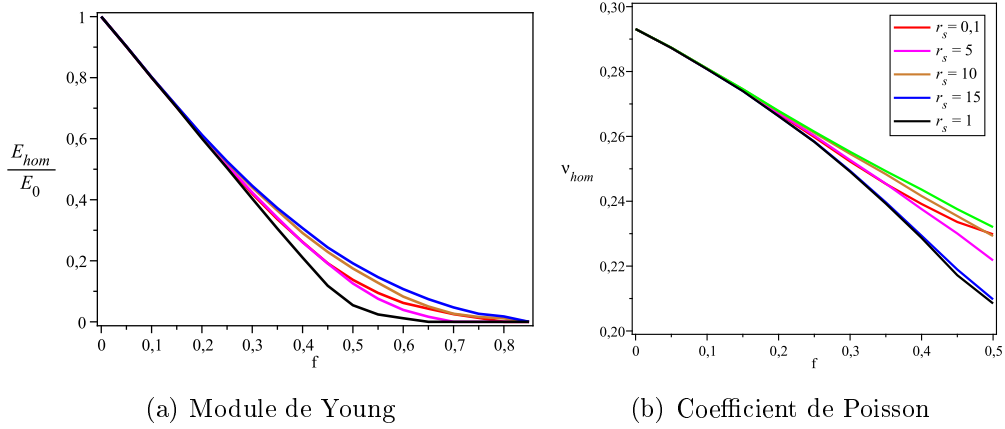


FIGURE 1.3 – Effet du rapport d'aspect r_s des inclusions (ellipsoïdales) sur le module de Young et le coefficient de Poisson homogénéisés (par schéma auto-cohérent) en fonction de la porosité f pour un matériau granulaire poreux - $E_0 = 31,034 \text{ GPa}$, $\nu_0 = 0.293$ (des inclusions)

celles-ci, puis en utilisant une méthode de changement d'échelle basée sur une équivalence énergétique, ils ont pu relier la contrainte macroscopique à la moyenne de la composante tangentielle de ce vecteur contrainte dans les interfaces. De cette manière, ils ont pu déterminer analytiquement le critère homogénéisé de rupture du composite granulaire induit localement par un glissement au niveau des interfaces. Les auteurs [Maalej et al., 2009] ont traité, dans un second travail, le cas d'interfaces frottantes dans un matériau granulaire en postulant un critère de Mohr-Coulomb non-cohésif dans les interfaces, portant sur les moyennes de la composante tangentielle et de la composante normale du vecteur contrainte à leur niveau. Les auteurs ont pu alors déterminer le mode de rupture du matériau en supposant successivement des mécanismes de rupture ductile puis fragile puis en exprimant analytiquement le critère macroscopique ou la loi d'écoulement plastique induite par une rupture locale par frottement dans les interfaces.

Quant aux composites contenant des inclusions avec interphases (couches minces), plusieurs travaux ont permis d'étudier une rupture, dans les interphases combinée ou pas avec une rupture dans le cœur. [Sanahuja and Dormieux, 2005] ont par exemple étudié une rupture produite par un critère de Von Mises dans la couche en supposant le cœur

infiniment rigide pour déterminer le critère macroscopique de manière analytique dans le cas d'une rupture ductile. D'autres travaux sur la rupture des composites avec interphases ont été publiés par [Nguyen, 2012] qui utilisent d'autres critères locaux.

Pour le dernier type d'interfaces, produisant des discontinuités de contraintes, les travaux regardant leur effet sur la rupture des composites ne sont pas nombreux. L'un des rares travaux qu'on trouve dans la littérature est publié par [Dormieux and Kondo, 2010] dans le quel les auteurs utilisent le modèle de Gurson pour déterminer le critère homogénéisé induit par un critère local de Von Mises dans les interfaces.

En résumé on peut affirmer que plusieurs travaux traitant de la question de la rupture des matériaux par mécanismes d'interface existent dans la littérature. Les interfaces de discontinuité de contraintes sont moins évoquées en rupture que les autres types. Ici aussi tous les travaux cités dans cette section considèrent des inclusions sphériques. A notre connaissance, aucune référence n'examine la rupture par mécanisme d'interface dans les matériaux à inclusions de forme plus générale. Dans le chapitre 5.6 de ce manuscrit, nous présenterons une modélisation de la rupture par effets d'interface d'une telle morphologie inclusionnaire.

1.4 Matériaux modèles présentant des effets d'interfaces

Dans cette section nous présentons deux matériaux susceptibles de présenter des effets d'interfaces. Dans la littérature ces matériaux ont rarement été modélisés comme tels. En raison de leur importance dans l'industrie, la nécessité de disposer de modèles précis pour la prédiction de leur comportement mécanique en élasticité, poroélasticité et en rupture est évidente.

1.4.1 Nanocomposites

Les nanocomposites sont d'usages très répandus dans l'industrie d'aujourd'hui. Ils présentent des propriétés mécaniques, thermiques et électriques intéressantes. Ces pro-

priétés sont principalement dues à l'émergence de grandeurs de surface qui apparaissent exclusivement à des tailles infimes des hétérogénéités (de l'ordre du nanomètre). En effet, L'énergie de surface, généralement négligée, devient pour cette gamme de tailles d'hétérogénéités comparable à l'énergie de volume. En raison des longueurs caractéristiques de certains matériaux naturels, il est raisonnable de s'interroger sur l'importance de ces effets dans leurs propriétés mécaniques. C'est le cas de l'argilite. (conf. section 1.3.1)). Les matériaux nanostructurés qui doivent leur essor aujourd'hui à des propriétés autres que mécaniques peuvent également présenter ces effets d'interface. Il faut noter que les modèles mécaniques concernant ces matériaux sont peu nombreux dans la littérature. En effets mis à part les modèles élastiques cités en section 1.3.1 et 1.3.2, on ne trouve pas de travaux traitant du comportement mécanique de ces matériaux en poroélasticité ou en rupture.

1.4.2 Pâtes de ciment et gel de C-S-H

La pâte de ciment est un matériau composite contenant des phases d'hydrates, produits de la réaction d'hydratation du ciment (portlandite, célite calcite, gel de C-S-H...), des phases anhydres, réactifs non consommés par la réaction d'hydratation (clinker C_2S, C_3S , gypse...) et des vides occupés par de l'air ou de l'eau. Les propriétés mécaniques de la pâte de ciment (rigidité et résistance) représentent tout l'intérêt de ce matériau pour l'industrie de la construction. La connaissance de ces propriétés, leur prédiction et la détermination des paramètres les contrôlant sont d'un grand enjeu. Pour comprendre l'origine de ces propriétés il faut examiner la réaction d'hydratation du ciment qui permet à la pâte de durcir et d'acquérir ses propriétés.

Au moment du gâchage (ajout d'eau au ciment), correspondant au début de la réaction d'hydratation, les particules de ciment ne présentent presque pas de surfaces de contact entre elles ce qui explique une rigidité et une résistance quasi nulles. Au cours de la réaction, les particules de ciment (clinker) réagissent avec de l'eau et forment des hydrates à la périphérie des grains. Ces hydrates permettent d'augmenter la surface de contact entre grains et sont de ce fait à l'origine des modules élastiques ainsi que de la résistance de

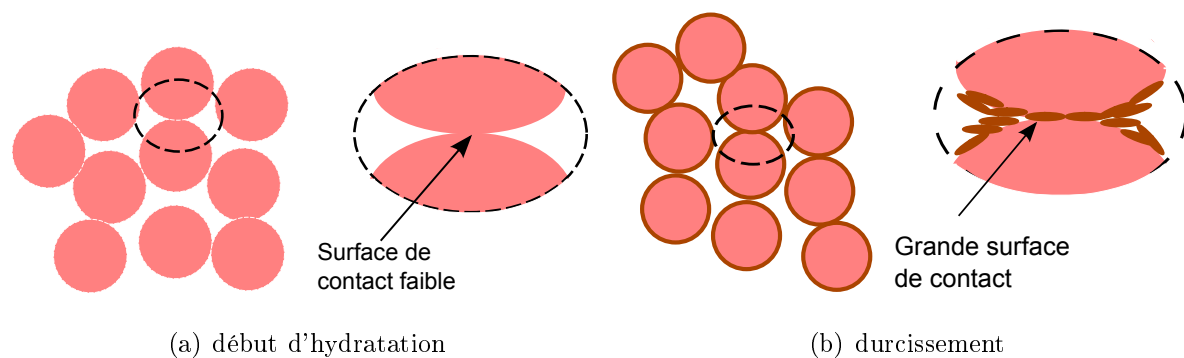


FIGURE 1.4 – Augmentation des surfaces de contact et durcissement de la pâte (augmentation de la rigidité)

la pâte. Les grains de ciment anhydres continuent à être consommés lors de l'évolution de la réaction d'hydratation. La formation d'hydrates permet alors de combler les vides dans la pâte et de la densifier (figure 1.4). L'un des principaux hydrates de la pâte de ciment est le gel de C-S-H. De nombreuses études lui attribuent un effet important sur les propriétés mécaniques (élastiques et de rupture) de la pâte en raison de sa fraction volumique importante. La figure 1.5 montre l'évolution des fractions volumiques des différentes phases dans la pâte ; elle permet d'observer une diminution conséquente de la porosité avec l'augmentation de la fraction du gel de C-S-H. Ceci porte à croire que les vides sont principalement comblés par le gel, ce qui confère à la pâte une augmentation de rigidité et de résistance. Comme la modélisation des gels de C-S-H est un passage nécessaire pour modéliser la pâte, de nombreux travaux de recherche lui ont été consacrés. La majorité des auteurs de ces travaux publiés considèrent le gel de C-S-H comme un matériau granulaire poreux, même si les interprétations diffèrent quant à la forme et la taille des inclusions solides de C-S-H et son importance dans la modélisation mécanique de ce matériau. En effet, [Ulm and Jennings, 2008] ont expliqué que l'influence de la forme des particules était un paramètre de second ordre devant la porosité à cause de la densité élevée du gel de C-S-H. [Sanahuja et al., 2008] ont montré, sur la base de résultats expérimentaux, que les particules de C-S-H ne pouvaient être considérées sphériques

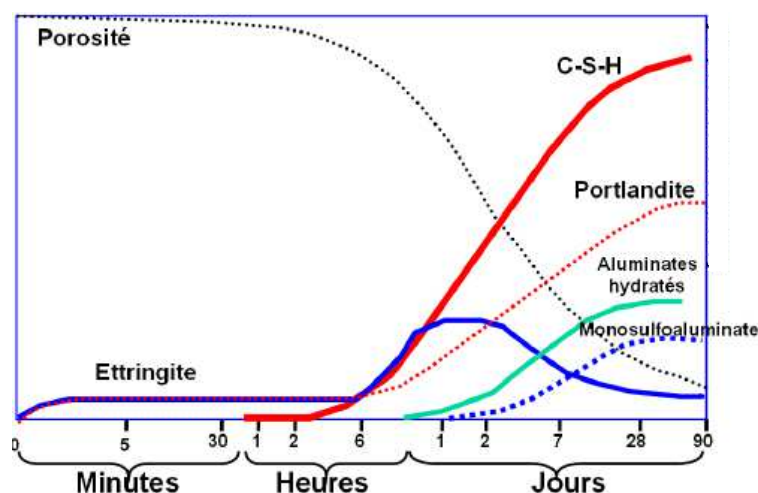


FIGURE 1.5 – Fractions volumiques des différentes phases dans la pâte de ciment au cours de l'hydratation - Augmentation de la fraction du gel de C-S-H avec la diminution de la porosité- source [Locher and Richartz, 1976]

dans les modèles micromécaniques puisque le gel exhibait des modules de Young loin d'être nuls (2 GPa) à des porosités de 0.6 [Feldman and Beaudoin, 1976] (si les particules étaient sphériques, elles donneraient une rigidité quasi-nulle à partir d'une porosité égale à 0.5, selon le seuil de percolation du schéma-auto-cohérent pour la forme sphérique). On peut donc retrouver dans la littérature différentes modélisations de la microstructure du gel de C-S-H qui diffèrent essentiellement par la forme donnée aux inclusions : [Sanahuja, 2008] utilise par exemple des inclusions ellipsoïdales aplaties ($r_s = 0.12$) pour la modélisation en élasticité et des plaquettes infiniment aplaties pour la modélisation en rupture, alors que [Termkhajornkit et al., 2014] et [Pichler et al., 2013] utilisent des aiguilles (inclusions infiniment allongées). Une micrographie de microscope électronique à transmission de [Taylor et al., 2010] permet d'illustrer la microstructure du gel (figure 1.6). On y observe la morphologie granulaire du gel de C-S-H à des densités différentes. Lorsque cette densité est suffisamment faible on peut distinguer des inclusions allongées de C-S-H, d'un rapport d'aspect nettement supérieur à 1. Ces inclusions semblent être orientées aléatoirement dans l'espace si l'on considère la micrographie dans sa globalité. Néanmoins on peut remarquer localement la dominance d'une orientation par rapport à

d'autres dans certaines régions. Ces observations seront exploitées dans les chapitres 3 et 5.6 lors de la modélisation des gels de C-S-H en élasticité et en rupture. Ces propriétés mécaniques du gel seraient fortement affectées par l'existence d'effets d'interface aux bord de ses inclusions. Nous explorerons dans les chapitres 3 et 5.6 l'hypothèse émise par [Sanahuja, 2008] sur l'existence d'effets d'interfaces de discontinuité de déplacement aux bords des grains de C-S-H. Nous en tiendrons compte dans nos modélisation en élasticité et en rupture.

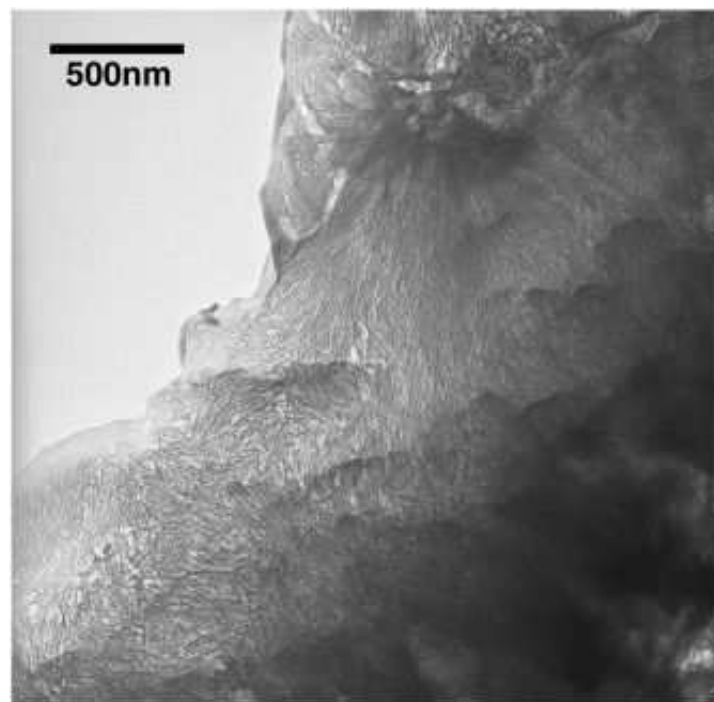


FIGURE 1.6 – Image obtenue par microscope électronique à transmission du gel de C-S-H dans la pâte de ciment [Taylor et al., 2010]

1.5 conclusion

Dans ce chapitre nous avons recensé les différents effets d'interfaces sur le comportement des matériaux composites ayant fait l'objet des études publiées dans la littérature. Nous avons, en premier lieu, expliqué l'origine physique de chacun de ces effets et nous avons cité les premiers travaux expérimentaux permettant d'en rendre compte. En se-

cond lieu, nous nous sommes intéressés aux investigations entreprises pour modéliser ces effets d'interface et les méthodes de leur intégration dans des modèles de comportement élastique et en rupture. Nous avons, par la suite, comparé les modèles élastiques existant dans la littérature, leur sensibilité et leur limitations. On conclut, à cet effet, que la majorité des modèles recensés considéraient une forme simplifiée d'inclusions (sphérique ou cylindrique), qui s'avère importante pour la détermination des propriétés élastiques mais pas suffisante pour l'élaboration de modèles prévisionnels précis. Les résultats graphiques exposés en 1.3 montrant l'importance de cette forme dans la détermination des propriétés élastiques des matériaux composites. Nous avons par ailleurs relevé, à travers cette analyse bibliographique, le manque de résultats sur le comportement poroélastique et le comportement en rupture des composites présentant des effets d'interfaces de discontinuité de contrainte. Nous avons fini par évoquer deux matériaux largement rencontrés dans l'industrie d'aujourd'hui et susceptible de présenter ces effets d'interfaces. Ces matériaux feront objet d'application des approches et modèles développés dans ce travail.

* * *

Chapitre 2

Comportement élastique et poroélastique des nanocomposites

Résumé : *L'objet de ce chapitre est de modéliser la microstructure d'un matériau nanocomposite polycristallin, de déterminer ses propriétés élastiques et poroélastiques macroscopiques en fonction des propriétés de ses constituants. Les effets d'interface, se produisant généralement aux bords des nanoparticules, et leurs conséquences sur les propriétés élastiques et poroélastiques globales seront pris en compte.*

Sommaire

2.1	Introduction	24
2.2	Nanocomposites et effets d'interface	25
2.3	Modélisation de l'effet d'interface	26
2.3.1	Modèles 2D et 3D de l'effet d'interface	27
2.3.2	Comportement élastique de l'interface	29
2.3.3	Interfaces intergranulaires et grains composites	32
2.4	Une extension du schéma auto-cohérent	33
2.4.1	Pore sphérique entouré d'une matrice infinie	34
2.4.2	Inclusion composite entourée par une matrice infinie	35
2.4.3	Obtention de la rigidité homogénéisée	38
2.5	Implémentation du schéma auto-cohérent avec effets d'interface	40
2.5.1	Modules élastiques du milieu homogénéisé	40
2.5.2	Développements en séries de la solution	42
2.6	Matériau nanoporeux saturé	44
2.6.1	Schéma auto-cohérent en nanoporomécanique	45
2.7	Conclusion	49

2.1 Introduction

Les nanocomposites sont de nos jours largement utilisés dans diverses applications pour leurs propriétés particulièrement intéressantes : des conductivités thermiques et électriques accrues (inclusions à nanotubes de carbone), des propriétés optiques, diélectriques et mécaniques (élasticité et résistance) nettement améliorées pour certains nanocomposites.

Sur le plan mécanique, les améliorations des caractéristiques élastiques et de résistance sont principalement attribuées à un rapport surface/volume élevé des nano-inclusions (particules, feuillets, fibres), combiné parfois à un rapport d'aspect (élancement) élevé. Comme conséquence de ce rapport surface/volume élevé, le volume nécessaire en renforcements est significativement moins élevé chez les nanocomposites que chez les composites classiques pour produire la même amélioration des propriétés macroscopiques. En effet, dans les nanocomposites la surface de contact matrice-particules ou inter-particules est typiquement un ordre de grandeur plus grande que celle dans les composites classiques. Cet « effet de taille » sur les propriétés mécaniques est dû en partie à l'existence de contraintes d'interfaces. Comme l'énergie de surface (proportionnelle à la surface totale des interfaces matrice-inclusion ou inclusion-inclusion) devient pour les nanocomposites comparable à l'énergie du volume (proportionnelle au volume total du composite), les contraintes de surfaces ne sont plus négligeables contrairement aux composites classiques. Ces contraintes de surface ne sont pas prises en compte par les schémas d'homogénéisation classiques. Certains travaux récents ont permis de généraliser quelques uns de ces schémas comme celui de Mori-Tanaka [Duan et al., 2005a], les bornes de Voigt et Reuss [Quang and He, 2007, Quang and He, 2008] ainsi que celles de Hashin-Shtrikman [Brisard et al., 2010a, Brisard et al., 2010b], pour incorporer ces contraintes d'interfaces. Le travail présenté dans la suite s'intègre dans cette logique. Une extension du schéma auto-cohérent permet de considérer les contraintes d'interfaces et d'étudier leur effet sur les propriétés macroscopiques élastiques des nanocomposites granulaires à particules sphériques. Ensuite, en utilisant les résultats de cette première partie, l'effet de ces interfaces

sur les propriétés poromécaniques effectives est analysé.

2.2 Nanocomposites et effets d'interface

La notion de mécanisme d'interface dans les composites n'est pas une notion nouvelle. En effet, plusieurs chercheurs ont mis en évidence son existence : [Mura and Furuhashi, 1984] ont observé, lors d'essais sur des polycristaux, des déplacements intergranulaires et les ont attribués à un effet d'interface. [Shiotz et al., 1998] ont proposé que le chargement macroscopique appliqué à un matériau granulaire était repris localement par une séparation et un déplacement local entre les grains.

L'existence de ces mécanismes constitue une piste pour tenter d'expliquer le comportement élastique et les mécanismes de rupture de certains matériaux composites. Dans le cas des composites classiques, ils traduisent une discontinuité de déplacement à la frontière des grains ou des phases. Ce type de mécanisme d'interface est souvent associé, dans la littérature, à une équation constitutive reliant vecteur contrainte au niveau de l'interface et discontinuité de déplacement au travers de celle-ci. Ce modèle est rencontré parfois dans la littérature sous le nom de "Linear spring model".

Dans les nanocomposites, en revanche, l'effet d'interface rencontré n'est pas dû au même phénomène physique. Celui-ci est plutôt relié au concept de contrainte d'interface qui se traduit par une discontinuité du vecteur contrainte à travers l'interface. Le champ de déplacement quant à lui est continu. Ce type de mécanisme est également associé à une équation constitutive qui découle de l'équilibre de l'interface. Elle représente une généralisation de l'équation de Young-Laplace rencontrée dans la capillarité. D'ailleurs la capillarité est un exemple particulier illustrant ce type de mécanisme d'interface. L'équation de Young-Laplace généralisée sera le point de départ pour modéliser l'effet d'interface dans la suite.

2.3 Modélisation de l'effet d'interface

Dans cette section, le formalisme mathématique permettant la prise en compte des effets d'interface dans le comportement mécanique des nanocomposites granulaires est abordé. Le type d'interface considéré est bien sûr le deuxième type mentionné plus haut, impliquant l'existence de contraintes surfaciques à la frontière des grains. Cette section décrit deux représentations mathématiques différentes de ce phénomène. Ces contraintes de surface sont familièrement rencontrées dans le phénomène de capillarité. Dans l'interface de capillarité, la tension de surface est un scalaire, noté ici γ , contrôlant l'intensité de la contrainte de surface $\boldsymbol{\sigma}^s$:

$$\boldsymbol{\sigma}^s = \gamma \mathbf{1}_T \quad (2.1)$$

où $\mathbf{1}_T$ est le tenseur unitaire du plan tangent à l'interface de capillarité I . Celle-ci est décrite mathématiquement par une surface. La tension de surface apparait dans l'équation de Young-Laplace. Dans le cas d'une interface fluide/fluide la discontinuité de pression à travers l'interface s'écrit :

$$[[p]] = \gamma \text{tr} \mathbf{b} \quad (2.2)$$

où \mathbf{b} est le tenseur de courbure. La discontinuité de pression est due à l'existence des contraintes surfaciques au niveau de l'interface.

De manière générale, en présence de contrainte surfacique le vecteur contrainte $\boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n}$ est discontinu à la traversée de l'interface. Sa discontinuité est reliée au champ de contrainte surfacique par la relation de Young-Laplace généralisée suivante :

$$[[\boldsymbol{\sigma}]] \cdot \underline{n} + \nabla^s \boldsymbol{\sigma}^s = 0 \quad (2.3)$$

où ∇^s représente l'opérateur divergence le long de l'interface I et \underline{n} le vecteur unitaire normal à l'interface. L'équation 2.3 montre que la contrainte de Cauchy et la contrainte surfacique ne sont pas de même dimension. Plus précisément, $\boldsymbol{\sigma}^s$ a la dimension d'une pression multipliée par une unité de longueur ($[\text{Pa} \times \text{m}]$). Ceci est essentiellement dû au support physique sur lequel la contrainte surfacique est définie, l'interface, qui est naturellement à deux dimensions.

2.3.1 Modèles 2D et 3D de l'effet d'interface

Pour relier la contrainte surfacique σ^s à un champ de contrainte standard tridimensionnel de Cauchy σ_{3D}^s (ayant la dimension d'une pression), l'idée est de partir de la relation asymptotique suivante [Müller and Saúl, 2004] :

$$\sigma^s(x, y, z) = \lim_{h \rightarrow 0} \int_z^{z+h} \sigma_{3D}^s(x, y, u) du \quad (2.4)$$

exprimée dans le système de coordonnées local où z représente la direction normale à l'interface.

L'équation 2.4 sous-entend que σ_{3D}^s présente une singularité et devrait être exprimé, de manière plus rigoureuse, avec le formalisme de la théorie des distributions :

$$\sigma_{3D}^s(x, y, z) = \sigma^s(x, y, z) \delta_I(x, y, z) \quad (2.5)$$

où δ_I est la distribution de Dirac de l'interface I . A l'inverse, si l'on considère une épaisseur h bien réelle, la singularité de $\sigma_{3D}^s(x, y, z)$ définie sur la couche $[z, z+h]$ disparaît :

$$\sigma^s(x, y, z) = \int_z^{z+h} \sigma_{3D}^s(x, y, u) du \quad (2.6)$$

Cette dernière équation indique que $\sigma_{3D}^s(x, y, u)$ est un $O(h^{-1})$. En tenant compte de cette condition, on pourra choisir dans la suite entre la modélisation 2D (surface) et la modélisation 3D (couche mince) pour prendre en compte les contraintes de surface. Dans ce qui suit, l'utilisation de ces deux modèles est détaillée pour des interfaces sphériques. L'équation d'équilibre sera explicitée pour arriver à la formulation de l'équation d'état. On note R le rayon de la sphère et h l'épaisseur de la couche fictive de façon à ce que $h \ll R$. Les équations de l'équilibre tridimensionnel s'écrivent pour la couche mince $R \leq r \leq R+h$ comme suit :

$$\partial_r \sigma_{rr} + \frac{1}{r} \partial_\theta \sigma_{r\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi \sigma_{r\phi} + \frac{1}{r} (2\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta} - \sigma_{\phi\phi} + \sigma_{r\theta} \cot \theta) = 0, \quad (2.7)$$

$$\partial_r \sigma_{r\theta} + \frac{1}{r} \partial_\theta \sigma_{\theta\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi \sigma_{\theta\phi} + \frac{1}{r} [(\sigma_{\theta\theta} - \sigma_{\phi\phi}) \cot \theta + 3\sigma_{r\theta}] = 0, \quad (2.8)$$

$$\partial_r \sigma_{r\phi} + \frac{1}{r} \partial_\theta \sigma_{\theta\phi} + \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi \sigma_{\phi\phi} + \frac{1}{r} (3\sigma_{r\phi} + 2\sigma_{\theta\phi} \cot \theta) = 0. \quad (2.9)$$

La contrainte de surface est alors définie comme la résultante des contraintes dans la couche (voir (2.6)) :

$$\sigma_{ij}^s = \int_{r=R}^{r=R+h} \sigma_{ij} dr \simeq h \sigma_{ij} \quad (i, j \in \{r, \theta, \phi\}), \quad (2.10)$$

Pour $h \ll R$, l'intégration des équations (2.7) à (2.9) pour r variant dans l'intervalle $R \leq r \leq R + h$ donne :

$$[\sigma_{rr}] + \frac{1}{R} \partial_\theta \sigma_{r\theta}^s + \frac{1}{R \sin \theta} \partial_\phi \sigma_{r\phi}^s + \frac{1}{R} (2\sigma_{rr}^s - \sigma_{\theta\theta}^s - \sigma_{\phi\phi}^s + \sigma_{r\theta}^s \cot \theta) = 0, \quad (2.11)$$

$$[\sigma_{r\theta}] + \frac{1}{R} \partial_\theta \sigma_{\theta\theta}^s + \frac{1}{R \sin \theta} \partial_\phi \sigma_{\theta\phi}^s + \frac{1}{R} [(\sigma_{\theta\theta}^s - \sigma_{\phi\phi}^s) \cot \theta + 3\sigma_{r\theta}^s] = 0, \quad (2.12)$$

$$[\sigma_{r\phi}] + \frac{1}{R} \partial_\theta \sigma_{\theta\phi}^s + \frac{1}{R \sin \theta} \partial_\phi \sigma_{\phi\phi}^s + \frac{1}{R} (3\sigma_{r\phi}^s + 2\sigma_{\theta\phi}^s \cot \theta) = 0, \quad (2.13)$$

Où $[\sigma_{ri}]$ représente la différence $\sigma_{ri}(r = R + h) - \sigma_{ri}(r = R)$ qui se réduit à une discontinuité de contrainte lorsque $h \rightarrow 0$, dans le cas de la modélisation de l'interface par une surface. Pour la modélisation en couche tridimensionnelle σ_{ri} est continu en $r = R$ et $r = R + h$. Les deux modélisations devant être équivalentes, on en déduit que σ_{ri}^s est du même ordre que $h[\sigma_{ri}]$ quand $h \rightarrow 0$. en utilisant ce résultat, les équations (2.11) à (2.13) montrent que $\sigma_{\theta\theta}^s$, $\sigma_{\phi\phi}^s$ et $\sigma_{\theta\phi}^s$ sont du même ordre que $R[\sigma_{ri}]$. En d'autres termes, les composantes σ_{ri}^s disparaissent et les équations (2.11), (2.12) et (2.13) se réduisent à (2.14), (2.15) et (2.16) :

$$\sigma_{\theta\theta}^s + \sigma_{\phi\phi}^s - R[\sigma_{rr}] = 0, \quad (2.14)$$

$$\partial_\theta \sigma_{\theta\theta}^s + \frac{1}{\sin \theta} \partial_\phi \sigma_{\theta\phi}^s + (\sigma_{\theta\theta}^s - \sigma_{\phi\phi}^s) \cot \theta + R[\sigma_{r\theta}] = 0, \quad (2.15)$$

$$\partial_\theta \sigma_{\theta\phi}^s + \frac{1}{\sin \theta} \partial_\phi \sigma_{\phi\phi}^s + 2\sigma_{\theta\phi}^s \cot \theta + R[\sigma_{r\phi}] = 0, \quad (2.16)$$

Celles-ci constituent la forme particulière de l'équation (2.3) pour les interfaces sphériques.

Pour résumer, deux représentations mathématiques de la même quantité physique peuvent être utilisées :

- des contraintes de surface singulières $\sigma^s \delta_I$ concentrées dans des interfaces sans épaisseur,

- des contraintes de volume fictives $\boldsymbol{\sigma}^s/h + O(h^0)$ distribuées sur une interface fictive d'épaisseur finie h . Le terme dominant est de l'ordre de h^{-1} . La valeur de h est sans importance du moment que $h \ll R$.

Les deux représentations sont équivalentes tant que l'épaisseur h est petite devant la longueur caractéristique des hétérogénéités (le rayon des grains dans le cas présent).

2.3.2 Comportement élastique de l'interface

Dans le cas d'un comportement élastique linéaire de l'interface, la contrainte de surface $\boldsymbol{\sigma}^s$ est reliée au tenseur de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}^s$ dans l'interface par :

$$\boldsymbol{\sigma}^s = \mathbb{C}^s : \boldsymbol{\varepsilon}^s \quad (2.17)$$

Il est à remarquer que la rigidité 2D \mathbb{C}^s a la même dimension physique que la contrainte de surface. Comme le champ de déplacement est régulier, les composantes tangentielles du tenseur de déformation 3D $\boldsymbol{\varepsilon}$ sont continues à travers l'interface et donc la projection de $\boldsymbol{\varepsilon}$ sur le plan tangent à l'interface donne le tenseur $\boldsymbol{\varepsilon}^s$. Plus explicitement, on peut introduire, à la manière de [Quang and He, 2008], le tenseur de second ordre $\mathbf{L} = \mathbf{1} - \underline{\underline{n}} \otimes \underline{\underline{n}}$ (de composantes $L_{ij} = \delta_{ij} - n_i n_j$) et le tenseur projecteur \mathbb{T} d'ordre 4 défini par :

$$\mathbb{T} = \mathbf{L} \otimes \mathbf{L} \quad \text{avec} \quad T_{ijkl} = \frac{1}{2}(L_{ik}L_{jl} + L_{il}L_{jk}) \quad (2.18)$$

$\mathbf{1} = \delta_{ij} \underline{\underline{e}}_i \otimes \underline{\underline{e}}_j$ étant le tenseur identité du second ordre défini à l'aide du symbole de Kronecker δ_{ij}

Le tenseur de déformation surfacique $\boldsymbol{\varepsilon}^s(\underline{\underline{z}})$ au point $\underline{\underline{z}}$ de l'interface est défini sur le plan tangent à l'interface (de vecteur normal $\underline{\underline{n}}$) et s'écrit :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^s(\underline{\underline{z}}) = \mathbb{T}(\underline{\underline{z}}) : \boldsymbol{\varepsilon}^+(\underline{\underline{z}}) = \mathbb{T}(\underline{\underline{z}}) : \boldsymbol{\varepsilon}^-(\underline{\underline{z}}) \quad (2.19)$$

où $\boldsymbol{\varepsilon}^+(\underline{\underline{z}})$ et $\boldsymbol{\varepsilon}^-(\underline{\underline{z}})$ désignent les tenseurs de déformation 3D de part et d'autre de l'interface.

En d'autres termes, \mathbb{C}^s opère uniquement sur les composantes tangentielles du tenseur de déformation. Dans le cas d'inclusions sphériques, seules les composantes $\varepsilon_{\theta\theta}$, $\varepsilon_{\theta\phi}$ et $\varepsilon_{\phi\phi}$

interviennent dans l'équation (2.17). Nous venons de montrer comment déterminer les équations d'équilibre en 2D de l'interface à partir des conditions l'équilibre 3D standards d'une couche mince. De manière similaire, il sera utile de déterminer l'équation d'état 2D (2.17) d'une interface sphérique à partir de la loi de Hooke standard d'une couche mince 3D :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}_{3D} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.20)$$

\mathbb{C}_{3D} est une rigidité standard isotrope caractérisée par un module de Young E et un coefficient de Poisson ν , ou alternativement, par des modules de compression et de cisaillement k et μ définis par :

$$k = \frac{E}{3(1-2\nu)} \quad ; \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (2.21)$$

de manière à écrire \mathbb{C}_{3D} comme suit :

$$\mathbb{C}_{3D} = 3k\mathbb{J} + 2\mu\mathbb{K} \quad (2.22)$$

(2.22) est la forme standard d'un tenseur de rigidité isotrope, dans laquelle \mathbb{J} et \mathbb{K} sont les tenseurs de projection sphérique et déviatorique du quatrième ordre. Maintenant en reprenant les équations (2.10) et (2.17), la méthodologie se base sur l'identité suivante :

$$\mathbb{C}^s : \boldsymbol{\varepsilon}^s = \lim_{h \rightarrow 0} \int_R^{R+h} \mathbb{C}_{3D} : \boldsymbol{\varepsilon} \, dr \quad (2.23)$$

La composante selon rr de cette équation tensorielle s'écrit :

$$\sigma_{rr}^s = kh(\varepsilon_{rr} + \varepsilon_{\theta\theta} + \varepsilon_{\phi\phi}) + \frac{2}{3}\mu h(2\varepsilon_{rr} - \varepsilon_{\theta\theta} - \varepsilon_{\phi\phi}) \quad (2.24)$$

En annulant σ_{rr}^s pour les raisons expliquées plus haut on obtient :

$$\varepsilon_{rr} = -\frac{\nu}{1-\nu}(\varepsilon_{\theta\theta} + \varepsilon_{\phi\phi}) \quad (2.25)$$

qui est une forme particulière, en coordonnées sphériques de :

$$\varepsilon_{nn} = \boldsymbol{\varepsilon} : \underline{n} \otimes \underline{n} = -\frac{\nu}{1-\nu} \mathbf{L} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.26)$$

En utilisant l'équation (2.25), l'intégration des autres composantes de l'équation tensorielle (2.20) donne :

$$\begin{aligned}\sigma_{\theta\theta}^s &= \frac{Eh}{1+\nu}(\varepsilon_{\theta\theta} + \frac{\nu}{1-\nu}(\varepsilon_{\theta\theta} + \varepsilon_{\phi\phi})) \\ \sigma_{\phi\phi}^s &= \frac{Eh}{1+\nu}(\varepsilon_{\phi\phi} + \frac{\nu}{1-\nu}(\varepsilon_{\theta\theta} + \varepsilon_{\phi\phi})) \\ \sigma_{\theta\phi}^s &= \frac{Eh}{1+\nu}\varepsilon_{\theta\phi}\end{aligned}\tag{2.27}$$

qui prend la forme classique suivante [Duan et al., 2005a, Quang and He, 2007] :

$$\begin{aligned}\sigma_{\theta\theta}^s &= \lambda^s(\varepsilon_{\theta\theta}^s + \varepsilon_{\phi\phi}^s) + 2\mu^s(\varepsilon_{\theta\theta}^s) \\ \sigma_{\phi\phi}^s &= \lambda^s(\varepsilon_{\phi\phi}^s + \varepsilon_{\theta\theta}^s) + 2\mu^s(\varepsilon_{\phi\phi}^s) \\ \sigma_{\theta\phi}^s &= 2\mu^s(\varepsilon_{\theta\phi}^s)\end{aligned}\tag{2.28}$$

λ^s et μ^s sont les modules d'élasticité 2D (i.e. de l'interface). Ils sont reliés aux modules 3D E et ν (tout comme on trouve dans [Wang et al., 2005]) par :

$$\lambda^s = \frac{Eh\nu}{1-\nu^2} \quad ; \quad \mu^s = \frac{Eh}{2(1+\nu)}\tag{2.29}$$

Comme mentionné plus haut, ε_{ij}^s ($i, j = \theta, \phi$) désignent les composantes de la déformation surfacique qui sont égales aux composantes correspondantes de la déformation volumique locale.

L'existence d'effets d'interface nécessite que λ^s et μ^s ne s'annulent pas quand $h \rightarrow 0$. En d'autres termes, le module de Young 3D E doit être un $O(h^{-1})$. Il convient alors de définir un module de Young surfacique E^s par : $E^s = Eh$. Ainsi les modules 2D de compression et de cisaillement k^s et μ^s peuvent être définis à partir de E^s et ν par les mêmes équations que dans la loi de Hooke :

$$E^s = Eh \quad ; \quad k^s = kh \quad ; \quad \mu^s = \mu h\tag{2.30}$$

On peut alors éventuellement écrire, à partir de (2.23) et (2.26) :

$$\mathbb{C}^s = (3k^s\mathbb{J} + 2\mu^s\mathbb{K}) : \left(\mathbb{I} - \frac{\nu}{1-\nu}\underline{n} \otimes \underline{n} \otimes \underline{L} \right) : \mathbb{T}\tag{2.31}$$

où $\mathbb{I} = \mathbb{J} + \mathbb{K}$ est le tenseur identité du quatrième ordre. Notons que le module de Young 2D de l'interface est relié à λ^s et μ^s par :

$$E^s = \frac{4\mu^s(\lambda^s + \mu^s)}{\lambda^s + 2\mu^s} \quad (2.32)$$

Réciproquement, les paramètres 3D peuvent être obtenus des modules d'élasticité 2D comme suit :

$$\nu = \frac{\lambda^s}{\lambda^s + 2\mu^s} \quad ; \quad E = \frac{E^s}{h} \quad (2.33)$$

Ainsi la surface de modules élastiques λ^s, μ^s (respectivement k^s, μ^s) est l'équivalent 2D de la couche mince 3D d'épaisseur $h \ll R$, ayant un module de Young du même ordre que h^{-1} . Ce résultat sera utilisé dans la suite du chapitre.

2.3.3 Interfaces intergranulaires et grains composites

Dans la suite de ce chapitre nous étudions le cas précis d'une microstructure granulaire à grains et pores sphériques ainsi que l'effet d'interface qui s'y produit au niveau des frontières de grains. Notons \mathcal{G}_i le grain n° i et I_{ij} l'interface au niveau de la surface de contact entre les deux grains \mathcal{G}_i et \mathcal{G}_j . L'énergie élastique emmagasinée dans les interfaces de la microstructure s'écrit alors :

$$W_{int} = \sum_{\{i,j\}} \int_{I_{ij}} \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}^s : \mathbb{C}^{s-1} : \boldsymbol{\sigma}^s dS = \sum_{\{i,j\}} \int_{I_{ij}} \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^s : \mathbb{C}^s : \boldsymbol{\varepsilon}^s dS \quad (2.34)$$

Cette dernière expression peut être réexprimée à l'aide d'une sommation sur les grains. Soit $\partial\mathcal{G}_i^s$ la partie de la frontière du grain \mathcal{G}_i qui est en contact avec d'autres grains solides. En prenant le soin de ne pas compter deux fois la même interface, l'expression de l'énergie devient :

$$W_{int} = \sum_i \int_{\partial\mathcal{G}_i^s} \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}^s : \mathbb{C}^{s'} : \boldsymbol{\varepsilon}^s dS \quad \text{avec} \quad \mathbb{C}^{s'} = \frac{1}{2} \mathbb{C}^s \quad (2.35)$$

Une telle sommation sur les grains, au lieu d'une sommation sur les interfaces, suggère l'introduction du concept de grain composite, constitué d'un matériau de coeur ayant une certaine rigidité entouré par une interface fictive caractérisée par une rigidité $\mathbb{C}^{s'}$ (et des modules $\lambda^{s'} = \lambda^s/2, \mu^{s'} = \mu^s/2, k^{s'} = k^s/2$). L'introduction de ce concept revient

à dédoubler l'interface I_{ij} en deux parties égales rattachées successivement à $\partial\mathcal{G}_i^s$ et $\partial\mathcal{G}_j^s$. D'un point de vue énergétique, les deux approches sont clairement équivalentes. Il est également possible, à ce stade, de remplacer, dans le grain composite, l'interface fictive 2D de rigidité $\mathbb{C}^{s'}$ par une couche mince 3D d'épaisseur h et de rigidité $\mathbb{C}'_{3D} = \mathbb{C}_{3D}/2$ (comme il a été expliqué plus haut). Le coefficient de poisson ν' et le module de Young E' de cette couche mince fictive du grain composite sont :

$$\nu' = \nu \quad ; \quad E' = \frac{E}{2} = \frac{E^s}{2h} \quad (2.36)$$

De manière similaire, les modules 3D de compression et de cisaillement de la couche fictive s'écrivent :

$$k' = \frac{k}{2} = \frac{k^s}{2h} = \frac{k^{s'}}{h} \quad ; \quad \mu' = \frac{\mu}{2} = \frac{\mu^s}{2h} = \frac{\mu^{s'}}{h} \quad (2.37)$$

Ce concept de grain composite associé au modèle de couche mince sera d'une grande utilité pour l'implémentation du schéma d'homogénéisation auto-cohérent de la microstructure.

2.4 Une extension du schéma auto-cohérent

La morphologie polycristalline des nanocomposites granulaires qui est envisagée ici nous incite à tenter de généraliser le schéma auto-cohérent en y incorporant l'effet d'interface. Les résultats de l'étude qui suit pourraient potentiellement être utilisés pour des microstructures très diverses : pâtes de ciment, argiles...

Pour un matériau à deux phases (solide et pores), l'approche auto-cohérente classique basée sur la solution d'Eshelby [Eshelby, 1957] consiste à considérer une inclusion homogène, représentative de chaque phase, plongée dans un milieu infini ayant pour propriétés celles du milieu homogénéisé recherché. Ce milieu est soumis à l'infini à des conditions aux limites homogènes en déformation. Le but est de déterminer la réponse de l'inclusion à ce chargement à l'infini. En ce qui concerne le milieu solide, la section 2.3 suggère de prendre pour inclusion représentative un grain solide avec son interface, cette dernière étant remplacée en second lieu par une couche 3D mince. La sphère composite ainsi constituée est définie par un matériau de coeur ($r < r_0$) ayant pour rigidité \mathbb{C}_0 et un matériau de la

couche sphérique ($r_0 < r < r_1$) avec ($r_1 = r_0 + h, h \ll r_0$) ayant pour rigidité \mathbb{C}_1 définie à partir de (2.36). Les pores, quant à eux, sont représentés par une cavité sphérique. Nous rappellerons, en premier lieu, la mise en oeuvre du schéma autocohérent généralisé sans aucune hypothèse sur \mathbb{C}_1 ou h (sections 2.4.1, 2.4.2 et 2.4.3). Nous utiliserons ensuite ce résultat pour incorporer l'effet d'interface. Pour cela nous nous limiterons au cas où la rigidité de la couche est reliée à son épaisseur par $\mathbb{C}_1 = O(h^{-1})$ tout comme en équation (2.36).

Dans ce qui suit \mathbb{C}_{sc} désignera la rigidité homogénéisée recherchée (sc pour "self-consistent" ou auto-cohérente). Toutes les rigidités (tenseur du quatrième ordre) seront considérées isotropes et seront exprimées par :

$$\mathbb{C}_\alpha = 3k_\alpha \mathbb{J} + 2\mu_\alpha \mathbb{K} \quad (\alpha = 0, 1, sc) \quad (2.38)$$

2.4.1 Pore sphérique entouré d'une matrice infinie

Le premier problème d'Eshelby considère un pore sphérique entouré par une matrice infinie de rigidité \mathbb{C}_{sc} . Des conditions aux limites homogènes en déformation y sont appliquées à l'infini. Ces conditions définissent le déplacement à l'infini à l'aide de la déformation auxiliaire \mathbf{E}_0 (Fig.2.1) :

$$\underline{\xi}(\underline{z}) \rightarrow \mathbf{E}_0 \cdot \underline{z} \quad \text{quand} \quad |\underline{z}| \rightarrow \infty \quad (2.39)$$

La solution bien connue de ce problème d'Eshelby donne la déformation de la cavité en fonction de \mathbf{E}_0 sous forme linéaire, impliquant un tenseur de localisation d'ordre quatre \mathbb{A}_p :

$$\boldsymbol{\varepsilon}_p^{esh} = \mathbb{A}_p : \mathbf{E}_0 \quad \text{avec} \quad \mathbb{A}_p = (\mathbb{I} - \mathbb{P}_{sc} : \mathbb{C}_{sc})^{-1} \quad (2.40)$$

où \mathbb{P}_{sc} est le tenseur de Hill d'une sphère dans une matrice infinie de rigidité \mathbb{C}_{sc} . Comme cette dernière est considérée isotrope, caractérisée par un module de compression k_{sc} et

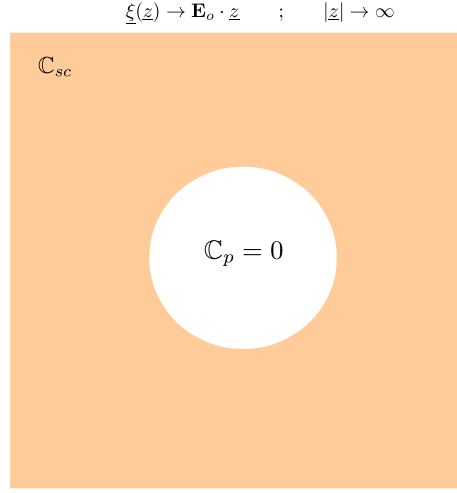


FIGURE 2.1 – Pore entouré par une matrice infinie

un module de cisaillement μ_{sc} , \mathbb{P}_{sc} prend la forme suivante [Dormieux et al., 2006] :

$$\mathbb{P}_{sc} = \frac{\alpha_{sc}}{3k_{sc}}\mathbb{J} + \frac{\beta_{sc}}{2\mu_{sc}}\mathbb{K} \quad \left\{ \begin{array}{l} \alpha_{sc} = \frac{3k_{sc}}{3k_{sc} + 4\mu_{sc}} \\ \beta_{sc} = \frac{6(k_{sc} + 2\mu_{sc})}{5(3k_{sc} + 4\mu_{sc})} \end{array} \right. \quad (2.41)$$

2.4.2 Inclusion composite entourée par une matrice infinie

Dans cette section, une inclusion composite est considérée dans un problème d'Eshelby et les conditions aux limites sont les mêmes que celles du problème précédent (fig.2.2). On recherche la moyenne de la déformation et de la contrainte dans l'inclusion composite. On considère successivement un chargement sphérique $\mathbf{E}_o = E_o \mathbf{1} = E_o(\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3)$ et un chargement déviatorique $\mathbf{E}_o = E_o(\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_1)$. Le principe de l'approche est pratiquement le même pour les deux cas de chargement [Love, 1944, Herve and Zaoui, 1993]. L'espace est divisé en trois régions : Le cœur de l'inclusion ($r < r_0$, tenseur de rigidité \mathbb{C}_0 et autres quantités avec un indice 0), la couche l'entourant ($r_0 < r < r_1$, tenseur de rigidité \mathbb{C}_1 et autres quantités avec un indice 1) et le milieu infini ($r \geq r_1$, tenseur de rigidité $\mathbb{C}_2 = \mathbb{C}_{sc}$ et autres quantités avec un indice 2).

Dans le cas d'un chargement sphérique, on recherche le champ de déplacement $\underline{\xi}^{(i)}$ dans

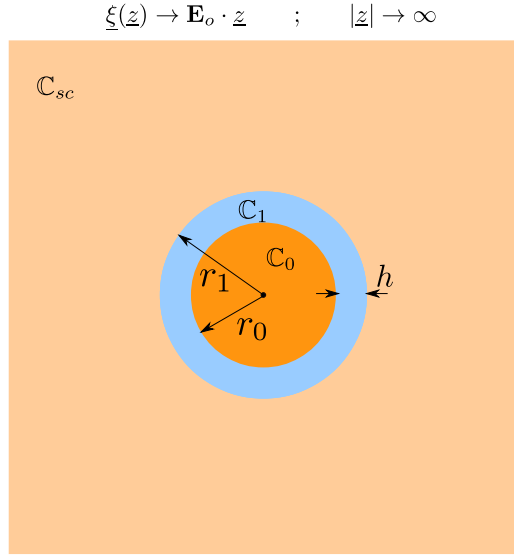


FIGURE 2.2 – Inclusion composite entourée par une matrice infinie

chacune des régions ($i = 0, 1$ et 2) sous la forme :

$$\underline{\xi}^{(i)} \begin{cases} \xi_r^{(i)} = A_i r + \frac{B_i}{r^2} \\ \xi_\theta^{(i)} = 0 \\ \xi_\phi^{(i)} = 0 \end{cases} \quad (2.42)$$

Pour éviter la singularité en $r = 0$, on prend $B_0 = 0$. Les conditions aux limites nous imposent que $A_2 = E_0$. Les quatre constantes qui restent sont déterminées à partir de la continuité du déplacement radial et de la contrainte radiale en $r = r_0$ et $r = r_1$.

Dans le cas d'un chargement à l'infini \mathbf{E}_0 déviatorique, le déplacement dans chaque région est recherché sous la forme de [Love, 1944] suivante :

$$\begin{aligned}
\underline{\xi}^{(0)} & \begin{cases} \xi_r^{(0)} = (A_0 r - \frac{6\nu_0 B_0 r^3}{(1-2\nu_0)}) \sin(2\theta) \cos(\phi) \\ \xi_\theta^{(0)} = (A_0 r - \frac{(7-4\nu_0)B_0 r^3}{(1-2\nu_0)}) \cos(2\theta) \cos(\phi) \\ \xi_\phi^{(0)} = -(A_0 r - \frac{(7-4\nu_0)B_0 r^3}{(1-2\nu_0)}) \cos(\theta) \sin(\phi) \end{cases} \\
\underline{\xi}^{(1)} & \begin{cases} \xi_r^{(1)} = (A_1 r - \frac{6\nu_1 B_1 r^3}{(1-2\nu_1)} + \frac{3C_1}{r^4} + \frac{(5-4\nu_1)D_1}{(1-2\nu_1)r^2}) \sin(2\theta) \cos(\phi) \\ \xi_\theta^{(1)} = (A_1 r - \frac{(7-4\nu_1)B_1 r^3}{(1-2\nu_1)} - \frac{2C_1}{r^4} + \frac{2D_1}{r^2}) \cos(2\theta) \cos(\phi) \\ \xi_\phi^{(1)} = -(A_1 r - \frac{(7-4\nu_1)B_1 r^3}{(1-2\nu_1)} - \frac{2C_1}{r^4} + \frac{2D_1}{r^2}) \cos(\theta) \sin(\phi) \end{cases} \\
\underline{\xi}^{(2)} & \begin{cases} \xi_r^{(2)} = (A_2 r + \frac{3C_2}{r^4} + \frac{(5-4\nu_2)D_2}{(1-2\nu_2)r^2}) \sin(2\theta) \cos(\phi) \\ \xi_\theta^{(2)} = (A_2 r - \frac{2C_2}{r^4} + \frac{2D_2}{r^2}) \cos(2\theta) \cos(\phi) \\ \xi_\phi^{(2)} = -(A_2 r - \frac{2C_2}{r^4} + \frac{2D_2}{r^2}) \cos(\theta) \sin(\phi) \end{cases}
\end{aligned} \tag{2.43}$$

Ces expressions font intervenir neuf constantes A_i , B_i , C_i et D_i . Les conditions aux limites à l'infini donnent clairement $A_2 = E_0$. Les huit autres constantes sont déterminées par la continuité du déplacement et du vecteur contrainte à travers les surfaces $r = r_0$ et $r = r_1$. Le champ de contrainte dans la région n^oi est ensuite déterminé par l'équation d'état $\sigma^{(i)} = \mathbb{C}_i : \nabla \xi^{(i)}$.

La moyenne de la déformation $\bar{\varepsilon}_{0+1}^{esh}$ et la moyenne de la contrainte $\bar{\sigma}_{0+1}^{esh}$ dans l'inclusion composite (cœur + couche) sont déterminées comme suit :

$$\begin{aligned}
\bar{\varepsilon}_{0+1}^{esh} & \left(= \frac{1}{\Omega_{0+1}} \int_{\Omega_{0+1}} \varepsilon dV \right) = \frac{3}{4\pi r_1^3} \int_{r=r_1} \underline{\xi}^{(1)} \overset{s}{\otimes} \underline{e}_r dS \\
\bar{\sigma}_{0+1}^{esh} & \left(= \frac{1}{\Omega_{0+1}} \int_{\Omega_{0+1}} \sigma dV \right) = \frac{3}{4\pi r_1^2} \int_{r=r_1} \underline{e}_r \otimes \sigma^{(1)} \cdot \underline{e}_r dS
\end{aligned} \tag{2.44}$$

où $\underline{\xi}^{(1)}$ prend la forme de l'équation (2.42) ou (2.43), selon le chargement considéré : sphérique ou déviatorique. Dans l'équation (2.44), $\underline{a} \overset{s}{\otimes} \underline{b}$ représente la partie symétrique du produit tensoriel $\underline{a} \otimes \underline{b}$. L'exposant *esh*, utilisé à partir de l'équation (2.40), rappelle que les quantités sont solutions d'un problème de type Eshelby.

Puisque $\underline{\xi}^{(1)}$ et $\boldsymbol{\sigma}^{(1)}$ dépendent linéairement du paramètre de chargement \boldsymbol{E}_o , il est intéressant de réécrire l'équation (2.44) sous la forme suivante :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{0+1}^{esh} = \mathbb{A}_{0+1} : \boldsymbol{E}_o \quad ; \quad \bar{\boldsymbol{\sigma}}_{0+1}^{esh} = \mathbb{B}_{0+1} : \boldsymbol{E}_o; \quad (2.45)$$

où \mathbb{A}_{0+1} (resp. \mathbb{B}_{0+1}) est le tenseur (d'ordre quatre) de concentration de la déformation (resp. de la contrainte). Le tenseur de concentration de la déformation peut être divisé en une partie sphérique et une partie déviatorique comme suit :

$$\mathbb{A}_{0+1} = A_{0+1}^J \mathbb{J} + A_{0+1}^K \mathbb{K} \quad (2.46)$$

La composante sphérique s'obtient facilement sous la forme suivante, elle sera utilisée en section (2.6) :

$$A_{0+1}^J = \frac{(3k_{sc} + 4\mu_{sc})[(3k_1 - 3k_0)\rho^3 + 4\mu_1 + 3k_0]}{12(\mu_1 - \mu_{sc})(k_0 - k_1)\rho^3 + (4\mu_{sc} + 3k_1)(4\mu_1 + 3k_0)} \quad (2.47)$$

avec $\rho = r_0/r_1$.

2.4.3 Obtention de la rigidité homogénéisée

On considère à présent un volume élémentaire représentatif (*VER*) Ω du matériau granulaire nanocomposite. Il est soumis, à sa frontière $\partial\Omega$, à un champ de déformation macroscopique \boldsymbol{E} imposée par des conditions aux limites homogènes en déformation :

$$\underline{\xi}(\underline{z}) = \boldsymbol{E} \cdot \underline{z} \quad (\underline{z} \in \partial\Omega) \quad (2.48)$$

On recherche le tenseur de contrainte macroscopique $\boldsymbol{\Sigma}$ dans Ω , induit par ce chargement, sous la forme :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C}_{sc} : \boldsymbol{E} \quad (2.49)$$

L'idée la plus simple pour obtenir cette contrainte macroscopique vient du schéma auto-cohérent classique. Elle consiste à estimer la moyenne de la déformation $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_\alpha$ (resp. la moyenne de la contrainte $\bar{\boldsymbol{\sigma}}_\alpha$) dans une phase donnée α du VER réel, par les quantités correspondantes dans un problème d'Eshelby, dans lequel une inclusion de la phase α

serait plongée dans une matrice infinie ayant pour propriétés élastiques celles du milieu homogénéisé recherché (voir sections 2.4.2 et 2.4.1) :

$$\bar{\epsilon}_\alpha \approx \bar{\epsilon}_\alpha^{esh} \quad ; \quad \bar{\sigma}_\alpha \approx \bar{\sigma}_\alpha^{esh} \quad (2.50)$$

L'étape suivante consiste à écrire la règle de la moyenne de la déformation et de la moyenne de la contrainte. En notant f_α les fractions volumiques des phases, celle-ci s'exprime par :

$$\mathbf{E} = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \bar{\epsilon}_{\alpha} \quad ; \quad \Sigma = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \bar{\sigma}_{\alpha} \quad (2.51)$$

On rappelle alors que les sections 2.4.1 et 2.4.2 ont permis de déterminer l'estimation d'Eshelby de la moyenne de la contrainte et de la déformation dans le pore et dans l'inclusion composite (cœur + couche). Il suffit alors de combiner les équations 2.50 et 2.51 pour exprimer les champs macroscopique en fonctions des estimations d'Eshelby :

$$\mathbf{E} = f \epsilon_p^{esh} + (1 - f) \bar{\epsilon}_{0+1}^{esh} \quad (2.52)$$

$$\Sigma = (1 - f) \bar{\sigma}_{0+1}^{esh} \quad (2.53)$$

où f est la porosité du milieu granulaire. Dans l'équation (2.53) nous avons utilisé le fait que la moyenne de la contrainte dans le pore est nulle.

En introduisant les équations (2.40) et (2.45) dans (2.52) et (2.53) et en éliminant la variable auxiliaire \mathbf{E}_o , on obtient, en identifiant avec l'équation (2.49) :

$$\mathbb{C}_{sc} = (1 - f) \mathbb{B}_{0+1} : (f \mathbb{A}_p + (1 - f) \mathbb{A}_{0+1})^{-1} \quad (2.54)$$

Notons que l'équation (2.54) est une equation implicite de l'inconnue \mathbb{C}_{sc} puisque le terme de droite dépend aussi de \mathbb{C}_{sc} (conformément à l'équation (2.40)).

Des travaux récents [He et al., 2012] ont pu montrer que résoudre l'équation (2.54) par rapport à \mathbb{C}_{sc} reviendrait à résoudre l'équation suivante :

$$f \mathbb{A}_p + (1 - f) \mathbb{A}_{0+1} = \mathbb{I} \quad (2.55)$$

Ceci permet de généraliser une propriété bien connue des schémas auto-cohérents valable dans le cas d'inclusions sphériques. De manière plus pratique, on peut profiter de l'hypothèse d'isotropie des rigidités pour diviser l'équation (2.54) en partie sphérique et partie

déviatorique. Ceci donne deux équation scalaires couplées impliquant les modules de compression et de cisaillement k_{sc} et μ_{sc} . La partie sphérique donne l'équation suivante :

$$\begin{aligned} & [(3k_1 + 4\rho^3\mu_1)k_0 + 4\mu_1k_1(1 - \rho^3)] [3fk_{sc} - 4\mu_{sc}(1 - f)] \\ & + 4\mu_{sc}k_{sc} [3k_0(1 - \rho^3) + 3\rho^3k_1 + 4\mu_1] = 0 \end{aligned} \quad (2.56)$$

Cette équation peut être résolue par rapport à k_{sc} puis la solution est introduite dans l'équation issue de la partie déviatorique ; ce qui donne une équation polynomiale en μ_{sc} . L'équation déviatorique, sous sa forme générale, est malheureusement trop lourde pour être reportée dans ce manuscrit.

2.5 Implémentation du schéma auto-cohérent avec effets d'interface

Dans cette section, les expressions des modules homogénéisés d'un polycristal poreux à inclusions sphériques et effets d'interface, prenant en compte des contraintes de surface, sont déterminées sous forme analytique. Pour des raisons pratiques des expressions réduites, valables dans les cas limites, sont également présentées.

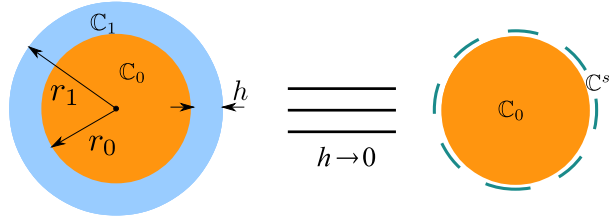


FIGURE 2.3 – Transition entre une rigidité d'interphase (ou de couche) 3D et une rigidité 2D d'interface "fictive"

2.5.1 Modules élastiques du milieu homogénéisé

Revenons maintenant au problème de l'effet d'interface dans les polycristaux (Fig.2.3). Dans la suite de la discussion commencée en section 2.3.3, il paraît évident que le meilleur

moyen d'exploiter le schéma auto-cohérent généralisé de la section 2.4 est de prendre $k_1 = k'$ et $\mu_1 = \mu'$, ce qui revient en exploitant l'équation (2.37) à :

$$k_1 = \frac{k^s}{2h} \quad \text{and} \quad \mu_1 = \frac{\mu^s}{2h} \quad (2.57)$$

Ces expressions sont remplacées dans l'équation sphérique ((2.56)) qui est ensuite résolue par rapport à k_{sc} . Le terme dominant en h est un $O(h^0)$ qui s'écrit :

$$k_{sc} = \frac{4\mu_{sc}(1-f)[r_0k_0(3k^s + 4\mu^s) + 6k^s\mu^s]}{r_0(3k^s + 4\mu^s)(3fk_0 + 4\mu_{sc}) + 18fk^s\mu^s} \quad (2.58)$$

Il convient de noter que la prise en compte de l'effet d'interface revient à la prise en compte de la taille des inclusions par l'intermédiaire du paramètre r_0 , chose qui fait défaut dans les schémas d'homogénéisation classiques. Un développement en séries complet de k_{sc} selon h est introduit dans la partie déviatorique de l'équation ((2.54)). De même, en gardant uniquement le terme dominant en h , on l'obtient μ_{sc} comme solution de l'équation polynomiale suivante :

$$A \left(\frac{\mu_{sc}}{\mu_0} \right)^3 + B \left(\frac{\mu_{sc}}{\mu_0} \right)^2 + C \left(\frac{\mu_{sc}}{\mu_0} \right) + D = 0 \quad (2.59)$$

où A , B , C et D sont des coefficients dépendant des paramètres k_0 , μ_0 , k^s , μ^s , r_0 et f . Ces coefficients sont reportés en Annexes (section A.1). L'expression analytique complète de μ_{sc} s'obtient en résolvant l'équation (2.59). Cette expression, non reportée dans ce manuscrit à cause de sa complexité, sera désignée par le terme « solution exacte » et sera étudiée numériquement. Des expressions analytiques approximatives de la solution pour des cas particuliers seront également présentés.

Pour étudier l'effet des interfaces sur la solution exacte, il paraît judicieux d'introduire le paramètre dimensionnel $\kappa = \frac{E^s}{r_0\mu_0}$. À l'aide de ce paramètre les modules 2D de compression et de cisaillement k^s et μ^s s'expriment par :

$$k^s = \frac{r_0\mu_0\kappa}{3(1-2\nu)} \quad , \quad \mu^s = \frac{r_0\mu_0\kappa}{2(1+\nu)} \quad (2.60)$$

Par sa définition même, κ compare la rigidité de l'interface à celle du coeur de l'inclusion. Il contient également une information sur la taille caractéristique des grains.

La solution numérique μ_{sc} de l'équation (2.59), normalisée par la solution auto-cohérente classique (sans effets d'interface), est tracée en fonction de la variable κ (Fig. 2.4). Comme on s'y attend, c'est une fonction strictement croissante de κ . On observe que la solution auto-cohérente classique est retrouvée quand κ tend vers zéro. Pour les grandes valeurs de κ , Les modules effectifs semblent dépendre linéairement de κ .

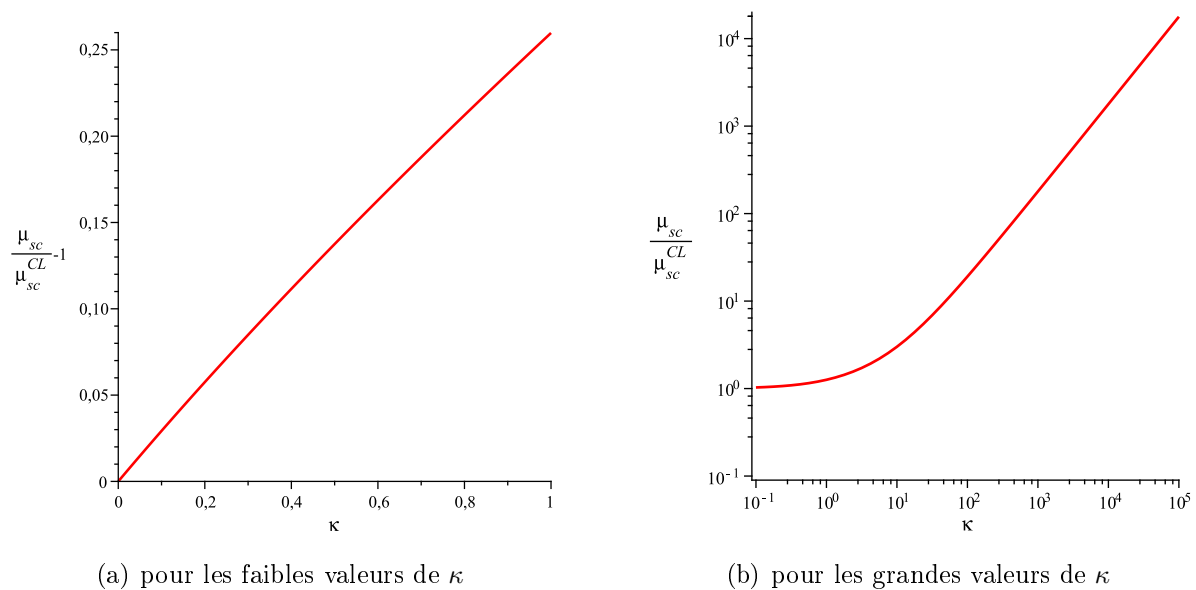


FIGURE 2.4 – Solution numérique de (2.59) : μ_{sc} fonction de κ . $\nu_0 = 0.3$, $\nu = 0.33$, $f = 0.15$.

2.5.2 Développements en séries de la solution

Les figures illustrant numériquement la solution dans la section précédente suggère l'exploration d'expressions approximatives de μ_{sc} pour les faibles valeurs et pour les grandes valeurs de κ .

- Pour les faibles valeurs de κ ($\kappa \ll 1$) :

Puisque la solution exacte de μ_{sc} permet de retrouver la solution auto-cohérente classique à $\kappa = 0$, une expression approximative de la solution, valable pour les faibles valeurs de

κ est recherchée sous la forme :

$$\mu_{sc} = \mu_{sc}^{CL}(1 + \kappa M + O(\kappa^2)) \quad (2.61)$$

où M dépend des paramètres du modèle. Il est noté que l'équation (2.61) présente la même structure que les lois empiriques obtenues dans [Wang et al., 2006] pour les matériaux nano-structurés.

En introduisant l'équation (2.61) dans l'équation (2.59) et en résolvant cette dernière par rapport à M , on détermine après un développement en série de Taylor autour de $\kappa = 0$, l'expression de M est trop lourde pour être reportée dans ce manuscrit.

– Pour les grandes valeurs de κ ($\kappa \gg 1$) :

Le graphe de droite de la figure 2.4 suggère que le terme dominant dans la solution de μ_{sc} dépend linéairement de κ . On recherche donc une solution approchée qui s'écrit sous la forme suivante :

$$\mu_{sc} = \mu_0(a\kappa + b + O(\kappa^{-1})) \quad (2.62)$$

où a et b sont des coefficients à déterminer. A cet effet, on introduit l'expression de μ_{sc} donnée par l'équation (2.62) dans l'équation (2.59) qui prend alors la forme d'une équation polynomiale du troisième degré en κ :

$$Y_3\kappa^3 + Y_2\kappa^2 + O(\kappa) = 0 \quad (2.63)$$

où Y_2 et Y_3 sont des combinaisons linéaires de a et b qui peuvent être obtenues à partir des expressions de A , B , C et D données en annexes A.1. D'ailleurs on peut observer que A est une constante indépendante de κ , alors que B est un polynôme de degré 1 en κ , C est un polynôme de degré 2 et D est un polynôme de degré 3. Pour que l'équation (2.63) soit satisfaite lorsque $\kappa \rightarrow \infty$, les coefficients Y_2 et Y_3 doivent être tous deux nuls. Ces deux conditions donnent un système de deux équations linéaires qui est résolu par rapport à a et b . Le résultat est reporté en annexes (section A.2). La figure 2.5 montre les gammes de valeurs de κ pour lesquelles les solutions approximatives sont valables.

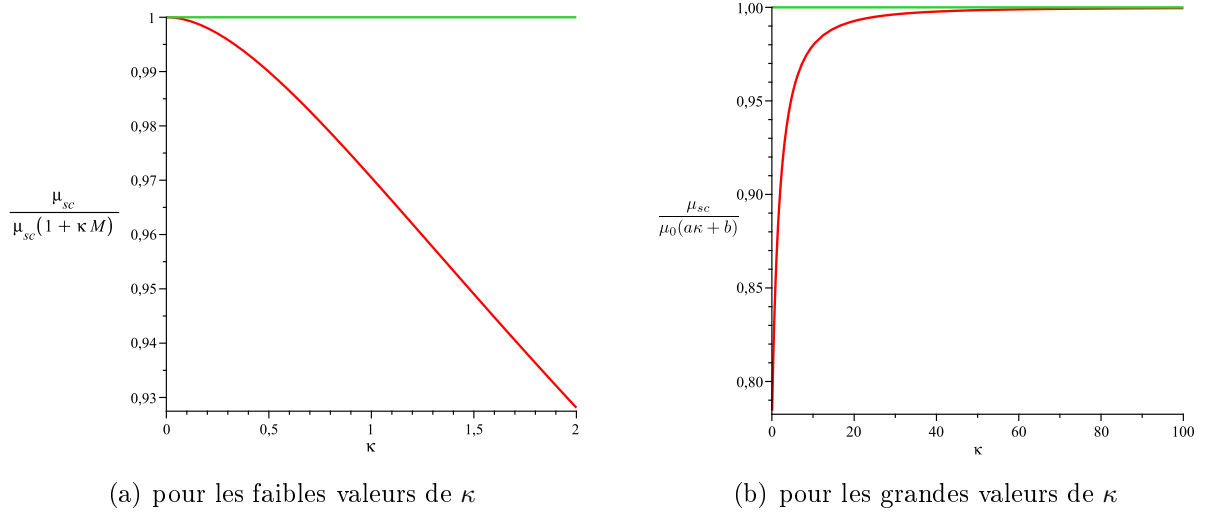


FIGURE 2.5 – Expressions approximatives de la solution exacte en fonction de κ . $\nu_0 = 0.3$, $\nu = 0.33$, $f = 0.15$.

2.6 Matériau nanoporeux saturé

La poromécanique considère l'effet d'un (ou plusieurs) fluides sous pression dans le réseau des pores d'un matériau poreux. La théorie classique de Biot [Biot, 1941, Coussy, 1995] explore l'approche thermodynamique du problème. Les propriétés poromécaniques peuvent alternativement être déterminées par une approche micromécanique (voir [Dormieux et al., 2006]). Dans cette section on voudrait utiliser cette deuxième approche pour observer le rôle de l'effet d'interface sur les propriétés poromécaniques dans le cas d'un matériau nanoporeux saturé.

Alors que la poromécanique classique suppose que le fluide est sous pression uniforme à l'échelle du VER, cette hypothèse peut sembler irréaliste pour un fluide confiné dans des nanopores. La pression (p) appliquée par le fluide sur le solide doit être considérée comme la somme de la pression de volume ("bulk pressure") (p_B) et d'une composante additionnelle appelée pression de disjonction ("disjonction pressure") (π_D) $p = p_B + \pi_D$. La pression de volume représente la pression du même fluide en condition de non confinement et peut être vue comme la pression thermodynamique du fluide. La pression de

disjonction, en revanche, dépend des phénomènes physiques mis en jeu ; elle est fonction de la taille caractéristique des pores [Brochard et al., 2012].

Dans le cadre d'un matériau granulaire monodisperse, on admet que la taille des pores est elle-même monodisperse. C'est ce qui rend possible la définition d'une pression de disjonction unique à l'échelle du VER. Les approches micromécaniques peuvent également prendre en compte une distribution de tailles de pores ce qui requiert l'introduction d'une distribution de pressions de disjonction (voir [Sanahuja et al., 2007, Lemarchand, 2001]). Dans la mise en œuvre d'une approche micromécanique pour ce problème, la pression du fluide à considérer n'est donc pas la pression thermodynamique mais bien la pression totale (p). En effet, l'information principale à prendre en compte dans cette approche est l'interaction solide-fluide qui se traduit par cette pression totale (voir [Dormieux et al., 2006]). Ceci sous-entend l'importance du concept de pression de disjonction. Dans le cas du matériau nanoporeux, puisque la pression de disjonction peut être considérée constante dans les nanopores (tailles des pores du même ordre), la réponse mécanique macroscopique du matériau est identique à celle d'un matériau poreux classique, dont les pores sont remplis d'un fluide à pression p au lieu de p_B . Cette simplification est admise dans le reste du chapitre.

2.6.1 Schéma auto-cohérent en nanoporomécanique

En poromécanique linéaire classique (voir [Coussy, 1995]), le comportement effectif du matériau est décrit par deux équations d'état. La première relie le tenseur macroscopique des contraintes Σ au tenseur macroscopique des déformations \mathbf{E} et à la pression des pores p :

$$\Sigma = \mathbb{C}^{hom} : \mathbf{E} - p\mathbf{B} \quad (2.64)$$

où \mathbf{B} est un tenseur du second ordre appelé le tenseur de Biot. La deuxième équation exprime la variation de volume des pores normalisée par le volume $|\Omega|$ du VER, comme

fonction de \mathbf{E} et p :

$$\frac{\delta V_p}{|\Omega|} = f \mathbf{1} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p = \mathbf{B} : \mathbf{E} + \frac{p}{N} \quad (2.65)$$

où l'on rappelle que $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p$ représente la moyenne de la déformation dans l'espace des pores et N est souvent appelé module de Biot.

Le but de cette section est d'établir les équations (2.64) et (2.65) à l'aide d'un raisonnement auto-cohérent. Pour cela on souhaite étendre l'approche décrite dans les sections 2.4 et 2.5 pour prendre en compte la pression p agissant dans l'espace des pores. On considère, de nouveau, deux problèmes auxiliaires (fig.2.6). Le premier est exactement le même que celui de la section 2.4.2 : une inclusion composite plongée dans une matrice infinie dont la rigidité est $\mathbb{C}_{sc} = \mathbb{C}^{hom}$. En revanche, pour le second, on considère un pore avec un fluide sous pression entouré par la même matrice infinie. Les mêmes conditions aux limites sont appliquées aux deux problèmes à l'infini $\underline{\xi}(z) \rightarrow \mathbf{E}_o \cdot \underline{z}$ quand $|\underline{z}| \rightarrow \infty$, où le tenseur de déformation auxiliaire \mathbf{E}_o joue le même rôle que dans la section 2.4. En

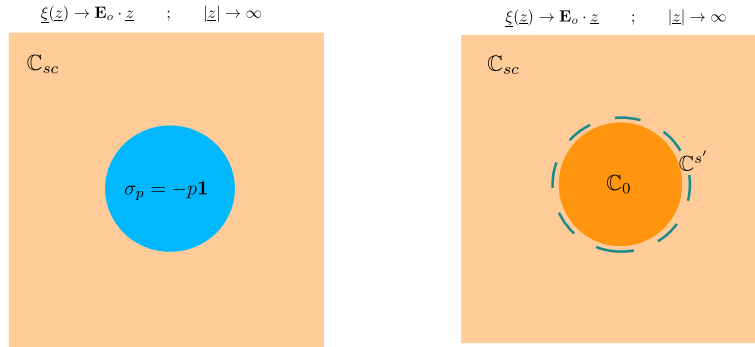


FIGURE 2.6 – Problèmes auxiliaires prenant compte du fluide sous pression

ce qui concerne le premier problème auxiliaire, la déformation moyenne dans l'inclusion composite est exprimée sous la forme suivante :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{inc} = \mathbb{A}_{inc} : \mathbf{E}_o \quad (2.66)$$

où \mathbb{A}_{inc} est le tenseur moyen de concentration de la déformation dans l'inclusion composite. Il est identique au tenseur \mathbb{A}_{0+1} (voir (2.45)) dans lequel k_1 et μ_1 sont définis par (2.57).

Pour le deuxième problème auxiliaire, la moyenne de la déformation dans le pore sous pression est donnée par [Dormieux et al., 2006] :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p = \mathbb{A}_p : \boldsymbol{E}_o + p\mathbb{A}_p : \mathbb{P}_{sc} : \mathbf{1} \quad (2.67)$$

où le tenseur moyen de concentration de la déformation \mathbb{A}_p et le tenseur de Hill \mathbb{P}_{sc} sont définis par (2.40).

La règle de la moyenne sur les déformations s'écrit :

$$\boldsymbol{E} = f\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p + (1 - f)\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{inc} \quad (2.68)$$

Ce qui donne avec les équations (3.48) et (2.67) :

$$\boldsymbol{E} = fp\mathbb{A}_p : \mathbb{P}_{sc} : \mathbf{1} + (f\mathbb{A}_p + (1 - f)\mathbb{A}_{inc}) : \boldsymbol{E}_o \quad (2.69)$$

Le tenseur de déformation auxiliaire \boldsymbol{E}_o est ensuite exprimé en fonction du tenseur réel de déformation macroscopique \boldsymbol{E} et de la pression des pores :

$$\boldsymbol{E}_o = (f\mathbb{A}_p + (1 - f)\mathbb{A}_{inc})^{-1} : (\boldsymbol{E} - pf\mathbb{A}_p : \mathbb{P}_{sc} : \mathbf{1}) \quad (2.70)$$

En faisant appel à l'équation (2.55), cette dernière expression de \boldsymbol{E}_o se simplifie en :

$$\boldsymbol{E}_o = \boldsymbol{E} - pf\mathbb{A}_p : \mathbb{P}_{sc} : \mathbf{1} \quad (2.71)$$

En remplaçant cette expression dans (2.67), $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p$ devient une fonction de \boldsymbol{E} et p :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_p = \mathbb{A}_p : \boldsymbol{E} + p(\mathbb{I} - f\mathbb{A}_p) : \mathbb{A}_p : \mathbb{P}_{sc} : \mathbf{1} \quad (2.72)$$

Ceci vient confirmer le fait que la variation de volume des pores peut être exprimée sous la forme de l'équation (2.65) et permet de déduire le tenseur ainsi que le module de Biot \boldsymbol{B} et N :

$$\boldsymbol{B} = f\mathbf{1} : \mathbb{A}_p \quad (2.73)$$

et

$$\frac{1}{N} = f(\mathbf{1} - \boldsymbol{B}) : \mathbb{A}_p : \mathbb{P}_{sc} : \mathbf{1} \quad (2.74)$$

Ces expressions théoriques de \mathbf{B} et N dépendent du tenseur du 4^{ème} ordre inconnu \mathbb{C}_{sc} . En tirant parti de l'isotropie du matériau, le tenseur de Biot, sphérique du second ordre dans ce cas, s'écrit $\mathbf{B} = \beta \mathbf{1}$ (β coefficient de Biot). Des expressions simples de β et de N peuvent alors être obtenues en fonction de k_{sc} et μ_{sc} :

$$\beta = \frac{((3k_0 + 4\mu_{sc})(1 - \nu) + \mu_0\kappa) f}{(3k_0 f + 4\mu_{sc})(1 - \nu) + f\mu_0\kappa} \quad (2.75)$$

$$\frac{1}{N} = \frac{3f(1 - \nu)(1 - f)}{(3k_0 f + 4\mu_{sc})(1 - \nu) + f\mu_0\kappa}$$

L'effet d'interface sur le couplage poromécanique peut alors être discuté, tout comme pour la solution élastique, dans les deux cas asymptotiques $\kappa \ll 1$ et $\kappa \gg 1$:

– Pour les faibles valeurs de κ :

$$\beta = \beta^{CL} + \frac{4f\mu_{sc}^{CL}[\mu_0 - 3k_0M(1 - \nu)](1 - f)}{(3fk_0 + 4\mu_{sc}^{CL})^2(1 - \nu)}\kappa \quad (2.76)$$

$$\frac{1}{N} = \frac{1}{N^{CL}} \left[1 - \frac{f\mu_0 + 4M(1 - \nu)\mu_{sc}^{CL}}{(1 - \nu)(3fk_0 + 4\mu_{sc}^{CL})}\kappa \right]$$

où β^{CL} et N^{CL} désignent les valeurs de β et N prédites par le schéma auto-cohérent classique (sans effets d'interface) :

$$\beta^{CL} = \frac{(3k_0 + 4\mu_{sc}^{CL})f}{3fk_0 + 4\mu_{sc}^{CL}} \quad ; \quad \frac{1}{N^{CL}} = \frac{3(1 - f)f}{3fk_0 + 4\mu_{sc}^{CL}} \quad (2.77)$$

le paramètre M a été introduit en équation 2.61.

– Pour les grandes valeur de κ :

$$\beta = f \frac{1 + 4a(1 - \nu)}{f + 4a(1 - \nu)} \quad (2.78)$$

$$\frac{1}{N} \rightarrow 0 \text{ quand } \kappa \rightarrow \infty$$

où le paramètre a a été introduit dans l'équation (2.62) et explicité en annexes. L'effet d'interface, représenté par κ , sur β et $\frac{1}{N}$ est illustré en figure 2.7.

N est une fonction croissante de la rigidité d'interface. Dans le cas classique, N_{CL} est également une fonction croissante de la rigidité de la phase solide (voir (2.77)). En revanche, l'effet d'interface sur le coefficient de Biot β est moins évident à prévoir. En fait

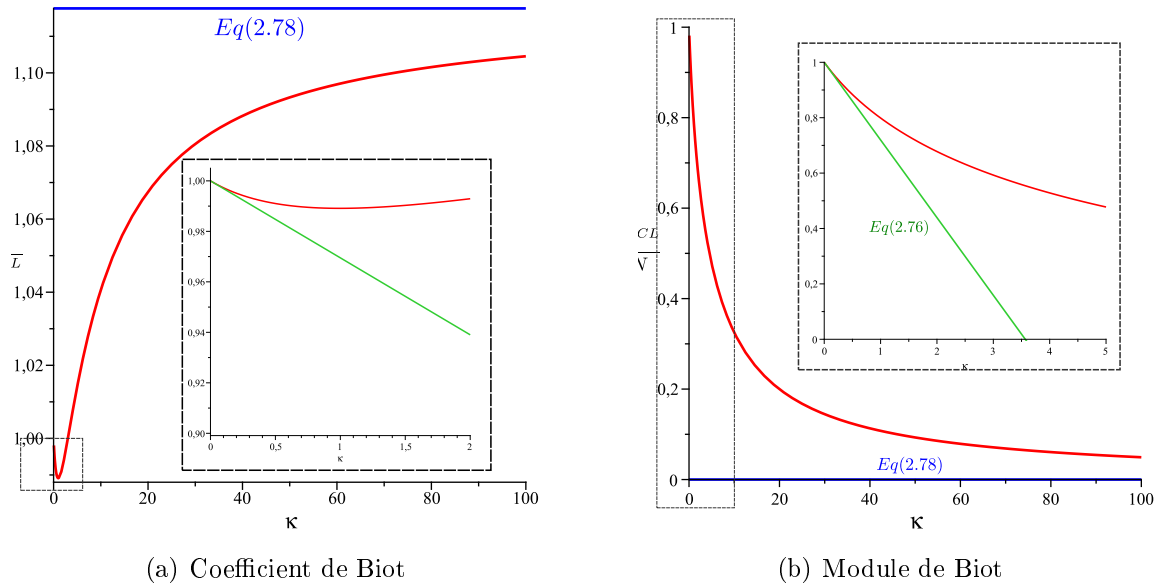


FIGURE 2.7 – Effets d’interface sur le coefficient et le module de Biot. $\nu_0 = 0.3$, $\nu = 0.33$, $f = 0.15$.

on observe une diminution de ce coefficient pour les faibles valeurs de κ puis une augmentation à partir d’une certaine rigidité d’interface vers la valeur donnée par l’asymptote. Comme prévu par les développements de Taylor de β et $1/N$ pour les faibles valeurs de κ , les deux paramètres poromécaniques tendent vers les valeurs classiques quand $\kappa \rightarrow 0$.

2.7 Conclusion

On s’est intéressé, dans ce chapitre, aux effets d’interface sur les propriétés élastiques et poroélastiques des nanocomposites granulaires poreux. On a montré en premier lieu la spécificité et l’origine physique de ce type d’interface rencontré exclusivement dans les nanocomposites par rapport à celui qu’on rencontre dans les composites classiques. Ensuite on a établi deux descriptions mathématiques équivalentes décrivant une interface et une couche mince. Cette équivalence a permis d’utiliser le concept de grain composite dans un schéma auto-cohérent généralisé, pour décrire la microstructure granulaire des nanocomposites étudiés. L’effet d’interface a été pris en compte dans ce schéma en se mettant dans les conditions assurant l’équivalence entre la couche mince (du grain composite) et

l'interface. Les modules élastiques homogénéisés ont ainsi pu être obtenus analytiquement et étudiés numériquement en fonction d'un paramètre adimensionnel κ caractérisant l'effet d'interface. Cette étude nous a suggéré de chercher des expressions simplifiées pour approximer ces modules dans les cas où $\kappa \ll 1$ et $\kappa \gg 1$. L'effet d'interface s'est avéré négligeable lorsque $\kappa \rightarrow 0$ et la solution auto-cohérente classique des modules homogénéisés a été retrouvée dans ce cas. En revanche, l'utilisation du schéma auto-cohérent classique pour les nanocomposites (susceptibles de présenter ces effets d'interface) sous-estimerait la rigidité réelle du matériaux. On a noté au passage que l'incorporation de l'effet d'interface dans le schéma auto-cohérent a donné une dépendance vis à vis de la taille des inclusions, chose qui fait défaut dans les schémas d'homogénéisation classiques.

La dernière partie de ce chapitre a été consacrée à l'étude de l'effet d'interface sur les propriétés poroélastiques. Les résultats de la première partie ont été exploités pour déterminer les expressions exactes et approchées du module et coefficient de Biot. Celles-ci ont été étudiées en fonction du même paramètre d'interface κ . Le couplage poromécanique s'est avéré fortement affecté par les contraintes de surface. L'augmentation de la rigidité d'interface fait augmenter le module de Biot et fait augmenter, à partir d'une certaine valeur du module d'interface, le coefficient de Biot. Ces tendances n'auraient pu être prédites autrement que par une analyse micromécanique.

L'étude réalisée dans ce chapitre s'applique très bien à certains géomatériaux dont les inclusions sont de taille nanométrique comme les matériaux à base argileuse et les matériaux cimentaires. Ces matériaux comprennent généralement des réseaux de nanopores saturés en eau. On peut citer pour exemple l'argilite de Bure dont la distribution de taille des pores montre un pic autour des 20 nm mais une grande partie de ses pores est en dessous de cette valeur [Robinet et al., 2012], ce qui en fait un nanocomposite granulaire poreux.

* * *

Chapitre 3

Comportement élastique des matériaux granulaires avec inclusions allongées et effets d'interface : cas des gels de C-S-H

Résumé : *L'objet de ce chapitre est de modéliser le comportement élastique des gels de C-S-H, hydrate principal de la pâte de ciment, matériau à microstructure granulaire à inclusions solides allongées présentant des effets d'interface de type discontinuité de déplacement. Le but essentiel sera de prendre en compte ces effets d'interface sur les propriétés élastiques effectives de ce matériau.*

Sommaire

3.1	Introduction	52
3.2	Composite granulaire à inclusions sphériques et effets d'interface	53
3.2.1	Modèle élastique existant pour le cas sphérique	53
3.2.2	Approches énergétiques de la notion d'inclusion équivalente	55
3.2.3	Comparaison et validation des approches	61
3.3	Composite granulaire à inclusions ellipsoïdales allongées et effets d'interface	70
3.3.1	Considérations géométriques	70
3.3.2	Approches énergétiques donnant des inclusions équivalentes	72
3.3.3	Comparaison des approches dans le cas ellipsoïdal	75
3.3.4	Modules homogénéisés du matériau granulaire à inclusions ellipsoïdales et effets d'interface : cas du gel de C-S-H	76
3.4	Conclusion	82

3.1 Introduction

Dans ce chapitre nous nous consacrons à l'étude du comportement élastique des gels de C-S-H que nous considérons comme composites granulaires poreux ayant des grains solides élancés (sphéroïdes à rapport d'aspect $\omega > 1$). Ces grains présentent à leurs bords un effet d'interface largement rencontré dans les composites granulaires ou à matrice classiques. Le mécanisme local à l'origine de cet effet d'interface traduit une discontinuité du déplacement à travers les frontières de grains. Ce mécanisme a été évoqué dans certains cas, observé expérimentalement dans d'autres, pour les matériaux polycristallins [Wei and Amnand, 2004, Mura and Furuhashi, 1984]. Certains auteurs le voient à l'origine de la réponse d'un matériaux granulaire à un chargement macroscopique par des séparations et des glissements inter-granulaires et le tiennent pour responsable de certains modes de rupture locaux [Shiotz et al., 1998, Dormieux et al., 2007]. Cependant, jusqu'à présent, peu de travaux l'ont pris en compte dans la modélisation du comportement mécanique des composites, que ce soit en élasticité ou en rupture. Les quelques travaux récents, prenant en compte cet effet d'interface, concernent des microstructures à inclusions sphériques [Dormieux et al., 2007, Dormieux et al., 2010, Sanahuja, 2008, Maalej et al., 2009, Duan et al., 2007a] ce qui n'est pas le cas de la majorité des composites rencontrés. De plus il a été montré que la forme des inclusions a une influence considérable sur les propriétés mécaniques des composites [Sanahuja, 2008]. C'est pourquoi on se propose dans ce chapitre de modéliser en élasticité des composites granulaires à inclusions non sphériques (ellipsoïdales), présentant cet effet d'interface, afin d'obtenir leurs propriétés élastiques effectives. La présente étude est parfaitement transposable aux composites à matrice. L'approche énergétique utilisée sera d'abord validée sur le cas des inclusions sphériques, abordé dans la littérature avec d'autres approches [Sanahuja, 2008, Duan et al., 2007a, Duan et al., 2007b], puis étendue aux inclusions ellipsoïdales.

3.2 Composite granulaire à inclusions sphériques et effets d'interface

Dans cette section, nous étudions tout d'abord le cas d'un composite granulaire poreux à inclusions solides sphériques. Ces inclusions présentent des mécanismes d'interface se traduisant par des discontinuités de déplacement à leur bords. Nous nous proposons de modéliser l'effet de ces discontinuités sur les modules d'élasticité de ce type de matériaux à l'aide d'une méthode énergétique, puis de comparer les prédictions de cette méthode à ceux d'un modèle élastique établi dans la littérature prenant en compte cet effet d'interface.

3.2.1 Modèle élastique existant pour le cas sphérique

La question d'une microstructure polycristalline poreuse, constituée d'inclusions solides sphériques, entourées d'interfaces, produisant des discontinuités de déplacement, a déjà fait l'objet de certains travaux récents [Dormieux et al., 2010, Sanahuja, 2008, Duan et al., 2007a]. Le modèle élastique développé dans ces travaux fait intervenir l'effet d'interface à l'aide d'un tenseur du second ordre \mathbf{K} représentant la rigidité de l'interface et relié aux modules d'interface K_t et K_n par (3.2). Une des approches de résolution directe utilisées dans la littérature consiste à résoudre le problème d'Eshelby généralisé avec une inclusion composite (coeur de rigidité isotrope \mathbb{C}_0 et couche périphérique de rigidité \mathbb{C}_1 reliée à celle de l'interface) plongée dans une matrice infinie. Cette matrice est soumise à un chargement homogène en déformation à l'infini. Les expressions de Love [Love, 1944] du champ déplacement sont utilisées pour déduire le déplacement, la déformation et la contrainte dans chacune des couches (coeur, couche périphérique et matrice infinie) (section 2.4). La couche périphérique est ensuite dégénérée en interface en exprimant ses modules en fonction des modules de l'interface et de l'épaisseur de la couche h (celle-ci tendant vers zéro) : $k_1 = (K_n - 4/3K_t)h$, $\mu_1 = K_th$, $h \rightarrow 0$. Ensuite en adoptant un schéma auto-cohérent, les expressions analytiques des modules élastiques homogénéisés peuvent être obtenues. La rigidité isotrope du coeur de l'inclusion s'exprime en fonction

de son module de compression k_0 et de son module de cisaillement μ_0 .

$$\mathbb{C}_0 = 3k_0\mathbb{J} + 2\mu_0\mathbb{K} \quad (3.1)$$

\mathbb{J} et \mathbb{K} représentent les tenseurs d'ordre quatre sphérique et déviatorique. Le tenseur de rigidité d'interface s'exprime comme suit :

$$\mathbf{K} = K_n \underline{n} \otimes \underline{n} + K_t (\mathbf{1} - \underline{n} \otimes \underline{n}) \quad (3.2)$$

où \underline{n} est le vecteur normal à l'interface ; K_n et K_t les modules normal et tangentiel la caractérisant. Le tenseur de rigidité d'interface \mathbf{K} a pour intérêt de relier le vecteur contrainte au niveau de la frontière du grain (continu), à la discontinuité de déplacement à travers l'interface $[[\xi]]$:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n} = \mathbf{K} \cdot [[\xi]] \quad (3.3)$$

Il est alors clair, vue la définition du tenseur \mathbf{K} , que le module K_n agit sur la composante normale de la discontinuité de déplacement et que le module K_t agit sur la composante tangentielle. Ainsi en suivant cette démarche (ou d'autres équivalentes), les auteurs de ce modèle, parviennent à des expressions analytiques des modules de compression et de cisaillement homogénéisés. Le module de compression homogénéisé k_{sc} se met facilement sous la forme compacte de l'équation (3.4) dépendant notamment du module de cisaillement homogénéisé μ_{sc} . Ce dernier est solution d'une équation du troisième degré faisant intervenir les paramètres du modèle et dont la solution est un peu lourde à retranscrire :

$$k_{sc} = \frac{4(1-f)\mu_{sc}r_0K_nk_0}{12\mu_{sc}k_0 + 4\mu_{sc}K_nr_0 + 3fr_0K_nk_0} \quad (3.4)$$

r_0 étant le rayon des inclusions et f la porosité du matériau. Il convient de noter que les modules homogénéisés, obtenus dans le cadre de ce modèle, présentent une dépendance vis à vis de la taille caractéristique des inclusions. Cette dépendance est vraisemblablement due à la prise en compte de l'effet d'interface puisque elle est absente dans les modèles d'homogénéisation classiques ignorant cet effet (l'analyse dimensionnelle permettait déjà d'annoncer que le résultat inclurait un effet de taille) .

3.2.2 Approches énergétiques de la notion d'inclusion équivalente

Dans cette section, une méthode énergétique est utilisée pour définir une inclusion homogène (sans interface), énergétiquement équivalente à l'inclusion avec interface. Le but est de remplacer, à terme, dans la microstructure du matériau granulaire, les inclusions solides avec interfaces par des inclusions équivalentes. Celles-ci auront des propriétés élastiques équivalentes intégrant la contribution du coeur et celle de l'interface.

Dans ce cadre, plusieurs approches, dérivant de la même méthode, sont testées. Dans ces approches, chacune des inclusions est soumise à une condition uniforme en déformation à ses bords, de la forme :

$$\xi = \mathbf{E} \cdot \underline{Z} \quad \underline{Z} \in \partial\Omega \quad (3.5)$$

L'énergie potentielle (ou complémentaire) est d'abord minimisée pour obtenir le champ microscopique de déformation (ou de contrainte) du coeur de l'inclusion, sous une certaine forme. Celui-ci est ensuite utilisé dans l'expression de l'énergie de l'inclusion avec interface, qui est identifiée à celle de l'inclusion équivalente. On détermine ainsi les propriétés équivalentes.

Approche à champ de déformation microscopique uniforme

Nous supposons dans cette première approche que la déformation est uniforme dans le coeur de l'inclusion. Le champ de déplacement à l'intérieur de l'inclusion s'écrit en fonction du tenseur de déformation ε dans le coeur (que nous supposons uniforme) comme suit :

$$\xi = \varepsilon \cdot \underline{Z} \quad (3.6)$$

où ε est une inconnue. Comme aucun effort extérieur n'est imposé, l'énergie potentielle de cette inclusion est égale à l'énergie élastique qui s'écrit :

$$E_p = W = \frac{1}{2|\Omega|} \int_{\Omega} \varepsilon : \mathbb{C}_0 : \varepsilon d\Omega + \frac{1}{2|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \llbracket \underline{\xi} \rrbracket \cdot \mathbf{K} \cdot \llbracket \underline{\xi} \rrbracket dS \quad (3.7)$$

En vue du principe du minimum de l'énergie potentielle, la meilleure approximation du champ de déplacement réel dans l'inclusion avec interface, parmi les champs définis par

(3.6), est celle du minimum de la fonctionnelle (3.7). Les composantes de la déformation microscopique $\underline{\epsilon}$ doivent donc vérifier les équations suivantes :

$$\frac{\partial E_p}{\partial \epsilon_{ij}} = 0 \quad i, j \in \{1, 2, 3\} \quad (3.8)$$

La déformation microscopique est recherchée dans ce paragraphe sous forme uniforme. Elle intervient explicitement dans le premier terme intégral de l'expression de l'énergie potentielle mais également dans le deuxième terme intégral dans l'expression de la discontinuité du déplacement suivante :

$$[\underline{\xi}] = \underline{\xi}^+ - uv\underline{\xi}^- = \mathbf{E} \cdot \underline{z} - \underline{\epsilon} \cdot \underline{z} = (\mathbf{E} - \underline{\epsilon}) \cdot r_0 \underline{e}_r \quad (3.9)$$

En vue des equations (3.2) et (3.9), l'expression de l'énergie potentielle (3.7) devient :

$$E_p = \frac{1}{2} \underline{\epsilon} : \mathbb{C}_0 : \underline{\epsilon} + \frac{1}{2|\Omega|} \int_S (\mathbf{E} - \underline{\epsilon}) \cdot r_0 \underline{e}_r \cdot (K_n \underline{e}_r \otimes \underline{e}_r + K_t (\underline{e}_\theta \otimes \underline{e}_\theta + \underline{e}_\phi \otimes \underline{e}_\phi)) \cdot (\mathbf{E} - \underline{\epsilon}) \cdot r_0 \underline{e}_r dS \quad (3.10)$$

La minimisation de l'expression (3.10) permet de trouver les composantes de la solution $\underline{\epsilon}$ recherchée. Ces composantes sont introduites dans l'expression de l'énergie potentielle qui est identifiée à l'énergie potentielle de l'inclusion homogène équivalente. Cette dernière s'écrit sous les mêmes conditions aux bords comme suit :

$$E_p^{eq} = \frac{1}{2} \mathbf{E} : \mathbb{C}_{eq} : \mathbf{E} \quad (3.11)$$

Le champ de déplacement réel dépend linéairement de \mathbf{E} . Donc son énergie est nécessairement quadratique en \mathbf{E} et s'écrit de fait sous la forme (3.11). Cette remarque justifie théoriquement la recherche d'une "inclusion équivalente". En identifiant les expressions des énergies (3.10) et (3.11) tout en analysant leurs dépendances vis à vis des composantes du chargement \mathbf{E} , on peut écrire :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2 E_p}{\partial^2 E_{11}} = \frac{\partial^2 E_p^{eq}}{\partial^2 E_{11}} = k_{eq} + \frac{3}{4} \mu_{eq} \\ \frac{\partial^2 E_p}{\partial E_{11} \partial E_{22}} = \frac{\partial^2 E_p^{eq}}{\partial^2 E_{11} \partial E_{22}} = k_{eq} - \frac{2}{3} \mu_{eq} \end{array} \right. \quad (3.12)$$

Ce qui donne les expressions suivantes des modules équivalents :

$$\begin{aligned}\frac{k_{eq}}{k_0} &= \frac{\chi}{\chi + 3} \\ \frac{\mu_{eq}}{\mu_0} &= \frac{2m + 3\kappa}{2m + 3\kappa + 10}\end{aligned}\tag{3.13}$$

avec

$$\chi = \frac{r_0 K_n}{k_0}; \quad m = \frac{r_0 K_n}{\mu_0}; \quad \kappa = \frac{r_0 K_t}{\mu_0}\tag{3.14}$$

Il est à noter que ces modules équivalents rendent bien compte d'une dépendance de la taille caractéristique des inclusions, ce que prévoit le modèle établi dans la littérature. L'inclusion avec interface est caractérisée par k_0 , μ_0 , K_n et K_t ainsi que r_0 . On en rend compte par le quadruplet de paramètres (k_0, χ, m, κ) . On nourrit l'espoir que ces derniers pourraient être remplacés par deux paramètres équivalents, à savoir k_{eq} et μ_{eq} . Le champ de déformation optimal obtenu dans cette approche par minimisation de l'énergie potentielle n'est autre qu'une approximation du champ de déformation réel dans le coeur de l'inclusion. Il est en effet recherché dans un sous-espace de l'espace des solutions possibles de champs de déformations (les champs uniformes).

Approche à champ de contrainte microscopique uniforme

Dans cette section, nous appliquons le principe du minimum de l'énergie complémentaire à notre inclusion avec interface. Nous recherchons le champ microscopique de contrainte, tout d'abord sous forme uniforme. Les énergies mises en jeu sont donc exprimées en fonction du champ contrainte $\boldsymbol{\sigma}$. L'énergie élastique s'écrit :

$$W^* = \frac{1}{2|\Omega|} \int_{|\Omega|} \boldsymbol{\sigma} : \mathbb{C}_0^{-1} : \boldsymbol{\sigma} d\Omega + \frac{1}{2|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \underline{T} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \underline{T} dS\tag{3.15}$$

Le travail développé par le vecteur contrainte dans les déplacements imposés aux bords s'écrit :

$$\Phi^* = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \underline{T} \cdot \underline{\xi}^d dS = \frac{1}{2|\Omega|} \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{e}_r) \cdot (\mathbf{E} \cdot r_0 \underline{e}_r) dS\tag{3.16}$$

Donc pour cette inclusion avec interface, l'énergie complémentaire s'écrit :

$$E_c = W^* - \Phi^*\tag{3.17}$$

On approche le champ réel par un champ de contraintes uniforme dans l'inclusion. En vue du principe de minimum de l'énergie complémentaire, la meilleure approximation du champ réel par un champ uniforme est caractérisée par :

$$\frac{\partial E_c}{\partial \sigma_{ij}} = 0 \quad i, j \in \{1, 2, 3\} \quad (3.18)$$

La résolution de ce dernier système d'équation nous donne les composantes de la contrainte microscopique recherchée. Celles-ci sont à remplacer dans l'expression de l'énergie complémentaire (3.17) qui est ensuite identifiée à l'opposée de l'énergie potentielle de l'inclusion équivalente (3.11) :

$$\begin{cases} -\frac{\partial^2(E_c)}{\partial^2 E_{11}} = \frac{\partial^2 E_p^{eq}}{\partial^2 E_{11}} = k_{eq} + \frac{3}{4}\mu_{eq} \\ -\frac{\partial^2(E_c)}{\partial E_{11} \partial E_{22}} = \frac{\partial^2 E_p^{eq}}{\partial^2 E_{11} \partial E_{22}} = k_{eq} - \frac{2}{3}\mu_{eq} \end{cases} \quad (3.19)$$

Ces relations donnent directement les modules équivalents sous les formes adimensionnelles suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{k_{eq}}{k_0} &= \frac{\chi}{\chi + 3} \\ \frac{\mu_{eq}}{\mu_0} &= \frac{5m\kappa}{4\kappa + 6m + 5m\kappa} \end{aligned} \quad (3.20)$$

où κ , χ et m sont données par (3.14).

On peut noter que le module de compression obtenu ici a la même expression que celle obtenue par l'approche précédente. Ceci est dû au fait que les champs de déformation ϵ et de contrainte σ à l'intérieur de l'inclusion sont bien uniformes dans le cas de la compression. Une comparaison avec le modèle de la littérature, nous permettra d'affirmer par la suite que l'expression obtenue du module de compression équivalent par les deux approches est exacte. Pour le module de cisaillement, en revanche, une nouvelle expression est obtenue par cette approche. On ne peut affirmer à ce stade si cette expression représente une meilleure approximation du module équivalent exact que la précédente.

Ce dont on est sûr, c'est qu'une fois couplées à un schéma d'homogénéisation ces deux expressions du module équivalent donneront des approximations différentes des modules homogénéisés qui peuvent alors être comparés à la solution, supposée exacte, du modèle de la littérature (section 3.2.1).

Approche à champ de déformation microscopique quadratique

Pour l'approche qui suit, le même raisonnement que pour la section (3.2.2) est suivi. La différence réside seulement dans la forme du champ de déformation microscopique recherché pour le coeur de l'inclusion. En effet, dans la première approche, ce champ est supposé uniforme, ce qui n'est pas le cas en réalité pour un chargement quelconque. L'énergie potentielle est alors minimisée par rapport au champ de déformation microscopique dans l'espace des champs uniformes (par rapport aux six composantes indépendantes du tenseur de déformation). Enrichir la forme du champ recherché va nous permettre de nous rapprocher encore plus de la forme du champ réel. On pourra ainsi minimiser l'énergie potentielle sur un plus grand espace de champs possibles et donc obtenir un meilleur optimum qui nous donnera une meilleure estimation des modules équivalents. Comme on ne peut trouver une forme quadratique du champ de déplacement dans l'inclusion donnant par dérivation un tenseur de déformation de forme affine et symétrique, on opte alors pour une forme cubique du champ de déplacement donnant un tenseur de déformation de forme quadratique :

$$\underline{\xi}^- = \epsilon_0 \cdot \underline{z} + \frac{z_1^3}{3} \underline{u} + \frac{z_2^3}{3} \underline{v} + \frac{z_3^3}{3} \underline{w} \quad (3.21)$$

où \underline{u} , \underline{v} , \underline{w} sont des vecteurs donnés par :

$$\begin{aligned} \underline{u} &= u_1 \underline{e}_1 + u_2 \underline{e}_2 + u_3 \underline{e}_3 \\ \underline{v} &= v_1 \underline{e}_1 + v_2 \underline{e}_2 + v_3 \underline{e}_3 \\ \underline{w} &= w_1 \underline{e}_1 + w_2 \underline{e}_2 + w_3 \underline{e}_3 \end{aligned} \quad (3.22)$$

Avec cette forme du champ de déplacement, le tenseur de déformation microscopique s'obtient sous la forme suivante :

$$\epsilon = \epsilon_0 + z_1^2 \mathbf{G}_1 + z_2^2 \mathbf{G}_2 + z_3^2 \mathbf{G}_3 \quad (3.23)$$

ε_0 ayant des composantes constantes ; \mathbf{G}_1 , \mathbf{G}_2 et \mathbf{G}_3 , étant des tenseurs d'ordre deux donnés par :

$$\mathbf{G}_1 = \underline{u} \overset{s}{\otimes} \underline{e}_1 ; \quad \mathbf{G}_2 = \underline{v} \overset{s}{\otimes} \underline{e}_2 ; \quad \mathbf{G}_3 = \underline{w} \overset{s}{\otimes} \underline{e}_3 \quad (3.24)$$

Vu la forme du champ, l'énergie potentielle serait à priori à minimiser par rapport à quinze variables différentes, dont les valeurs optimales s'obtiennent en résolvant le système à quinze équations suivant :

$$\frac{\partial E_p}{\partial \varepsilon_{ij}} = 0 ; \quad \frac{\partial E_p}{\partial u_i} = 0 ; \quad \frac{\partial E_p}{\partial v_i} = 0 ; \quad \frac{\partial E_p}{\partial w_i} = 0 \quad i, j \in \{1, 2, 3\} \quad (3.25)$$

Même si ces quinze équations peuvent être dépendantes, l'expression de l'énergie obtenue après remplacement par les valeurs optimales est enrichie par rapport à celle de la première approche. Ceci donne naturellement des expressions plus complexes des modules équivalents :

$$\begin{aligned} \frac{k_{eq}}{k_0} &= \frac{\chi}{\chi + 3} \\ \frac{\mu_{eq}}{\mu_0} &= \frac{1}{5} \frac{10m^2 + 365\kappa m + 255\kappa^2 + 1134m + 1701\kappa}{2m^2 + 73\kappa m + 51\kappa^2 + 280m + 539\kappa + 1134} \end{aligned} \quad (3.26)$$

avec κ , χ et m donnés par (3.14).

L'expression du module de compression est toujours la même que celle prédite par les autres approches. Cependant l'expression du module de cisaillement obtenue est différente et enrichie par rapport aux premières approches. On en attend donner une meilleure approximation du module équivalent réel.

Approche à champ de contrainte microscopique polynomial

Dans cette section les mêmes développements que ceux de la section (3.2.2) sont reproduits avec une nouvelle forme du champ de contrainte microscopique. Le but d'obtenir une forme enrichie de l'énergie complémentaire et une meilleure approximation du module de cisaillement équivalent. Le champ de contrainte microscopique recherché se doit d'être statiquement admissible (i.e $\text{div}(\boldsymbol{\sigma}) = 0$) et symétrique. Comme la forme affine

n'apporte pas d'enrichissement de l'énergie complémentaire à cause de ces deux dernières conditions, la forme polynomiale suivante est choisie de manière à les respecter :

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{011} & \sigma_{012} + a_2 z_3^2 + a_4 z_3^4 & \sigma_{013} + b_2 z_2^2 + b_4 z_2^4 \\ \sigma_{012} + a_2 z_3^2 + a_4 z_3^4 & \sigma_{022} & \sigma_{023} + c_2 z_1^2 + c_4 z_1^4 \\ \sigma_{013} + b_2 z_2^2 + b_4 z_2^4 & \sigma_{023} + c_2 z_1^2 + c_4 z_1^4 & \sigma_{033} \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

La minimisation de l'énergie complémentaire se fait maintenant par rapport à douze variables, ce qui donne après remplacement et identification avec l'énergie complémentaire de l'inclusion équivalente, les expressions suivantes des modules équivalents :

$$\begin{aligned} \frac{k_{eq}}{k_0} &= \frac{\chi}{\chi + 3} \\ \frac{\mu_{eq}}{\mu_0} &= \frac{3}{35} (5005\kappa^2 m^2 + 14784\kappa m^2 + 5236\kappa^2 m + 10628m^2 + 8312\kappa m + 1080\kappa^2) m\kappa \\ &\quad / [(429m^3 + 792m^2 + 432m + 64)\kappa^3 + (1782m^2 + 2304m + 672)m\kappa^2 \\ &\quad + (2412m + 1632)m^2\kappa + 1064m^3] \end{aligned} \quad (3.28)$$

où κ , χ and m sont données par (3.14).

On constate que l'expression du module de compression est la même pour les quatre approches. Ce constat vient confirmer le fait que la contrainte et la déformation sont uniforme lors d'une compression. L'expression du module de cisaillement donnée par cette dernière approche plus complexe que les autres. Elle constitue, au moins en théorie, une meilleure approximation du module équivalent réel que l'approche à contrainte uniforme (puisque le sous-espace où l'on recherche la solution est plus grand). Les expressions obtenues pour ce module seront comparées entre elles et à la solution du modèle de la littérature dans la section suivante.

3.2.3 Comparaison et validation des approches

Les différentes approches énergétiques développées dans la section (3.2.2) ont donné lieu à des inclusions équivalentes homogènes, dotées de modules équivalents. Ces inclu-

sions sont destinées à remplacer les inclusions avec interfaces dans les schémas d'homogénéisation. Leurs modules équivalents représentent des estimations des modules équivalents réels. Dans le cadre des conditions aux limites de (3.5), on peut affirmer que les estimations fournies ont un statut de borne (ce qu'on ne peut affirmer en dehors de (3.2.2)) et démontrer (au préalable) l'existence d'un concept d'inclusion équivalente. Ainsi les approches recherchant un champ de déformation microscopique donneront des bornes supérieures des modules équivalents réels alors que les approches recherchant un champ de contrainte donneront des bornes inférieures. En conséquence, le module de compression équivalent obtenu par les quatre approches est le module équivalent réel. En revanche, les modules de cisaillement équivalents obtenus ne représentent que des bornes ou des approximations, plus ou moins précises, du module équivalent réel. Pour vérifier la précision de ces approximations une comparaison est menée à trois niveaux différents :

- Une comparaison entre les modules de cisaillement équivalents donnés par les approches
- Une comparaison dans le cadre d'un problème d'Eshelby généralisé dont la solution exacte peut être déduite du modèle de la littérature (3.2.1).
- Une comparaison dans le cadre d'une morphologie granulaire avec la solution exacte extraite également du modèle de la littérature (3.2.1).

Comparaison des approches entre elles

Nous reprenons ici les modules de cisaillement équivalents obtenus par les différentes approches d'inclusion équivalente (section 3.2.2). On rappelle que ces approches donnent des bornes, servant aussi d'estimations, du module de cisaillement équivalent réel, sous réserve de (3.2.2). La précision de ces estimations est mesurée par l'écart entre la borne supérieure (approches en déformation) et la borne inférieure (approches en contrainte). La comparaison est menée pour différentes valeurs du rapport $\frac{\kappa}{m} = \frac{K_t}{K_n}$ (figure 3.1). On observe de la figure 3.1 que l'effet d'interface étudié dans ce chapitre affaiblit le matériau de l'inclusion. Ceci est visible dans l'expression de k_{eq}/k_0 qui est toujours inférieure à 1 et qui tend asymptotiquement vers 1 lorsque m et κ tendent vers l'infini. Pour le module de

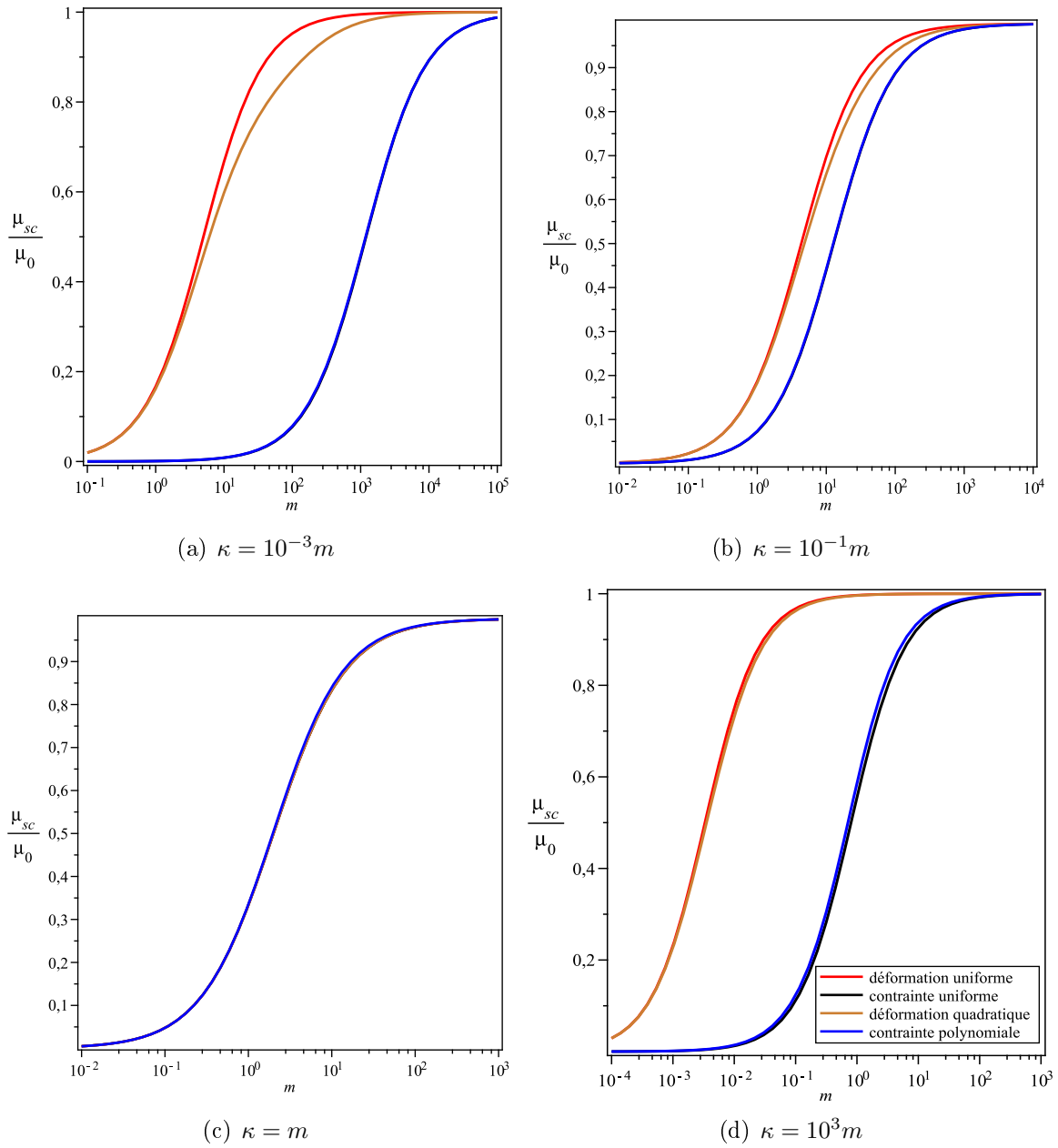


FIGURE 3.1 – Comparaison des modules de cisailment équivalents obtenus par les différentes approches

cisaillement, le même phénomène est observé numériquement. Les courbes de μ_{eq}/μ_0 ne tendent vers 1 que lorsque m et κ tendent vers l'infini (fig.3.1). On remarque également que la précision des bornes du module de cisailment dépend du rapport κ/m .

Comparaison des solutions des approches à la solution exacte dans un problème d'Eshelby

L'élasticité équivalente d'une inclusion avec interface dans un composite quelconque doit à priori dépendre du "milieu extérieur". Ce qui n'est pas le cas des inclusions équivalentes obtenues. Dans ce qui suit nous explorons ceci en comparant les prédictions des approches à la solution exacte dans le cadre général d'un problème d'Eshelby. Pour cela deux problèmes d'Eshelby sont considérés (fig.3.2). Le premier contient une inclusion sphérique avec interface et le deuxième contient l'inclusion homogène qui est supposée équivalente. Chacune des inclusions est plongée dans une matrice infinie. Les deux matrices sont faites du même milieu isotrope et homogène, de rigidité \mathbb{C}_m choisie isotrope. Ces matrices sont soumises à la même condition de bord à l'infini homogène en déformation : ($\underline{\xi} \rightarrow \mathbf{E}_0 \cdot \underline{z}$ quand $|\underline{z}| \rightarrow \infty$). Le champ de déformation macroscopique \mathbf{E}_0 est considéré déviatorique pour étudier uniquement la réponse au cisaillement puisque les approches prédisent correctement la réponse à un chargement volumique : $\mathbf{E}_0 = \underline{e}_1 \otimes \underline{e}_3 + \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_1$. Le premier problème d'Eshelby peut être résolu en adoptant la démarche expliquée en section (3.2.1) qu'on retrouve dans quelques travaux de la littérature [Hashin, 1991, Herve and Zaoui, 1993]. La résolution à l'aide de cette démarche donne en tout point les champs microscopiques de déplacement, de déformation et de contrainte. Quant au deuxième problème, il relève de la solution classique d'Eshelby [Eshelby, 1957] pour laquelle on donne à l'inclusion isolée les propriétés équivalentes d'une des approches énergétiques précédentes (fig.3.2). Il est alors facile de déterminer les énergies élastiques développées par chacune des inclusions puisque l'on dispose des champs microscopiques ou de leurs moyennes. Pour l'inclusion équivalente, cette énergie s'écrit en fonction de la déformation moyenne d'Eshelby comme suit :

$$W_{eq} = \frac{1}{2} \bar{\epsilon}^{esh} : \mathbb{C}^{eq} : \bar{\epsilon}^{esh} \quad (3.29)$$

où \mathbb{C}^{eq} est la rigidité équivalente isotrope obtenue par l'une des approches (section 3.2.2). Pour l'inclusion avec interface, l'énergie élastique réelle (ou "exacte") est calculée comme

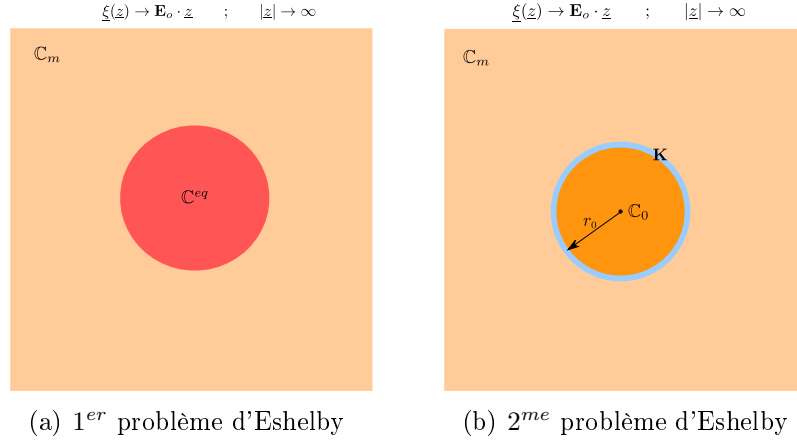


FIGURE 3.2 – problèmes d'Eshelby utilisant l'inclusion avec interface et l'inclusion équivalente dans le cadre d'une comparaison

suit :

$$W_{ex} = \frac{1}{2|\Omega|} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} d\Omega = \frac{1}{2|\Omega|} \int_{\partial\Omega} \underline{\xi}^+ \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \underline{n}) dS \quad (3.30)$$

Dans cette expression Ω représente le domaine volumique de l'inclusion avec interface, $|\Omega|$ son volume et $\partial\Omega$ sa frontière (domaine de l'interface). $\underline{\xi}^+$ désigne le champ de déplacement à la périphérie extérieure de l'interface.

La comparaison entre l'énergie exacte et les énergies équivalentes (données par l'équation (3.29) en considérant les \mathbb{C}_{eq} des différentes approches) est reportée en (fig.3.3) pour différentes valeurs du rapport κ/m .

Dans ces figures l'énergie élastique "exacte" (en rouge) est encadrée par les énergies équivalentes. Il faut noter que dans le problème d'Eshelby avec interface, les conditions sur le bord extérieur ne sont pas, à priori, du type (3.5) dans le cas du cisaillement. Le fait d'obtenir un encadrement de l'énergie "exacte" n'était donc pas une nécessité théorique. L'approche à déformation quadratique donne de meilleures prédictions que celle à déformation uniforme même à l'échelle de l'énergie et particulièrement pour le cas où $\kappa \ll m$. L'amélioration par l'approche à contrainte polynomiale est peu significative. Il convient de noter, comme dans la première comparaison, que les approches sont très précises lorsque κ et m sont du même ordre de grandeur.

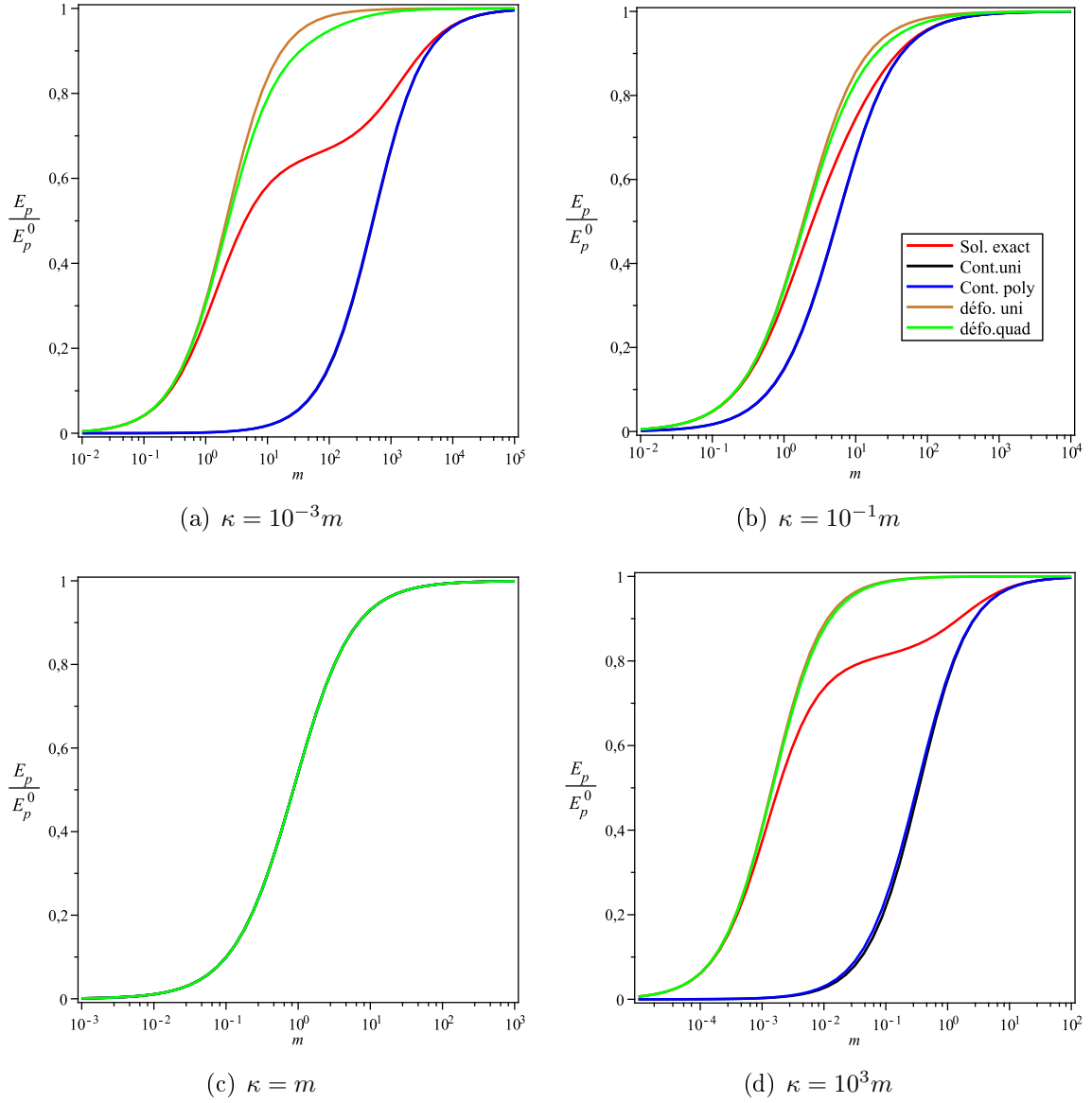


FIGURE 3.3 – Comparaison de l'énergie élastique de l'inclusion avec interface avec celles des inclusions équivalentes dans un problème d'Eshelby - énergie exacte, approches en contrainte, approches en déformation

Comparaison des approches à la solution exacte dans le cadre d'un matériau granulaire

Le but de cette comparaison est d'observer l'effet des paramètres morphologiques d'une microstructure granulaire sur la précision des approches dans leurs prédictions des modules équivalents réels de l'inclusion. Les deux paramètres influençant cette précision

sont la porosité du milieu granulaire et le coefficient de Poisson du matériau de cœur. On étudiera donc leurs effets sur le module de cisaillement équivalent dans le cas des faibles et des grands ordres du rapport κ/m , pour lesquels les approches divergent le plus. L'intérêt de cette démarche est de lever l'arbitraire sur le choix de \mathbb{C}_m (par rapport à la section précédente).

Considérons donc un matériau granulaire contenant des pores sphériques et des inclusions solides sphériques présentant un effet d'interface. Le matériau est soumis à un chargement homogène en déformation. La détermination des propriétés élastiques homogénéisées de ce matériau peut être faite en utilisant un schéma auto-cohérent [Sanahuja, 2008] dont la mise en oeuvre passe par la résolution de deux problèmes d'Eshelby. L'un de ces problèmes contient l'inclusion avec interface et l'autre le pore isolé, plongés, tout deux, dans des matrices infinie ayant les propriétés du milieu homogénéisé recherché. Une fois les modules homogénéisés déterminés (cf. section 3.2.1), on peut revenir au premier problème d'Eshelby et déterminer la moyenne de la déformation et de la contrainte dans l'inclusion avec interface, puisque la résolution passe par la détermination de ces champs microscopiques :

$$\bar{\sigma}_{inc} = \frac{3}{4\pi r_0^2} \int_{r=r_0} \underline{e}_r \otimes \sigma_m \cdot \underline{e}_r dS \quad (3.31)$$

$$\bar{\epsilon}_{inc} = \frac{3}{4\pi r_0^3} \int_{r=r_0} \underline{\xi}_m(r_0^+) \overset{s}{\otimes} \underline{e}_r dS$$

Les expressions de σ_m et $\underline{\xi}_m$ peuvent être trouvées dans [Hashin, 1991]. Les modules équivalents exacts de l'inclusion peuvent alors être obtenus en utilisant ces dernières expressions et en prenant un champ de déformation auxiliaire \mathbf{E}_0 volumique ou déviatorique, comme suit :

- Pour $\mathbf{E}_0 = \underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2 + \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3$:

$$\bar{\sigma}_{inc} = 3k_{ex} \bar{\epsilon}_{inc} \quad (3.32)$$

- Pour $\mathbf{E}_0 = \underline{e}_1 \otimes \underline{e}_2 + \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_1$:

$$\bar{\sigma}_{inc12} = 2\mu_{ex} \bar{\epsilon}_{inc12} \quad (3.33)$$

L'expression du module de compression équivalent exact (extrait de cette manière du modèle de la littérature) est la même que celle obtenue par les approches. En revanche, l'expression du module de cisaillement est différente. Elle dépend des propriétés du milieu homogénéisé (milieu de référence dans le premier problème d'Eshelby), chose qui fait défaut (par construction) aux modules équivalents déterminés par les approches. Cette dépendance peut être observée dans les figures (fig.3.4) et (fig.3.5) qui retracent le module équivalent exact pour différentes valeurs de la porosité et du coefficient de Poisson. On peut observer de ces figures que l'approche à contrainte uniforme donne une approximation satisfaisante du module équivalent exact surtout pour les porosités élevées. En effet la courbe de cette approche est pratiquement confondue avec la solution exacte pour une porosité approchant les $f = 0.5$. Cette valeur de la porosité correspond au seuil de percolation du schéma auto-cohérent pour des inclusions sphériques. La solution exacte reste bornée par les approches équivalentes lorsque $f < 0.5$ pour laquelle le schéma auto-cohérent est valable. Ceci permet également d'expliquer le fait que la borne inférieure n'a pu être enrichie significativement par l'approche à contrainte polynomiale. La borne supérieure, en revanche, est nettement améliorée par l'approche quadratique et semble susceptible de s'améliorer davantage vu l'écart qu'elle présente avec les solutions exactes. En comparant les figures (fig.3.4) et (fig.3.5) on peut observer que le coefficient de Poisson a moins d'influence sur la solution exacte que la porosité, ce qui en fait un facteur moins important de la validité des approches.

Pour finir avec cette section, nous tenons à préciser que les approches énergétiques ont été appliquées aux inclusions sphériques dans le but de s'assurer de leur validité et de la précision de leurs estimations. Ces approches étant concluantes pour la morphologie et la gamme de porosité nous intéressant, nous les appliquons dans la suite aux inclusions ellipsoïdales avec interfaces pour lesquels nous ne disposons pas de solution "exacte" de type Eshelby.

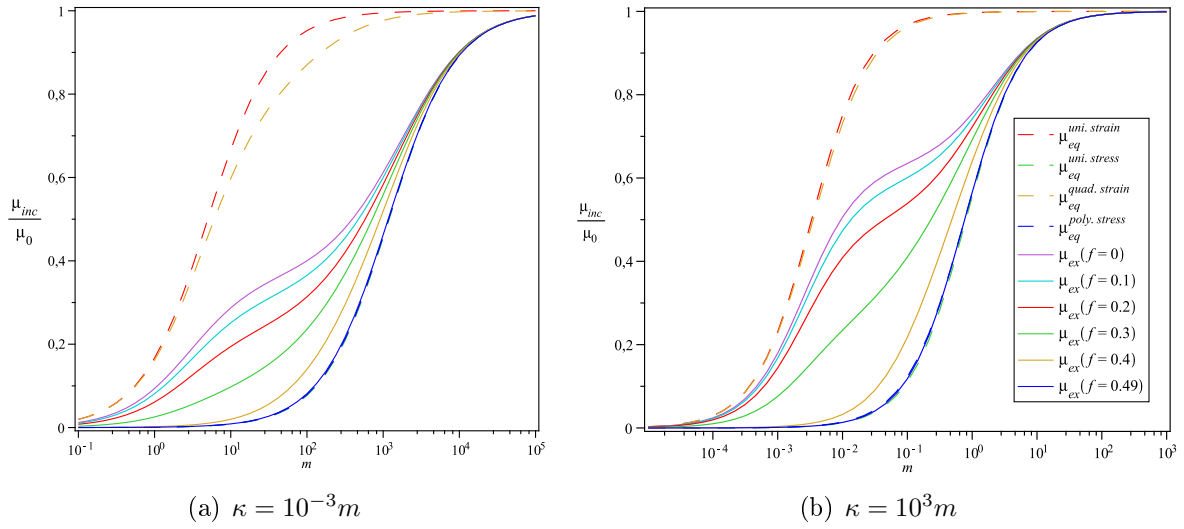


FIGURE 3.4 – Effet de la porosité du composite f sur la précision des approches dans la détermination d'un module de cisaillement équivalent - $\nu = 0.3$

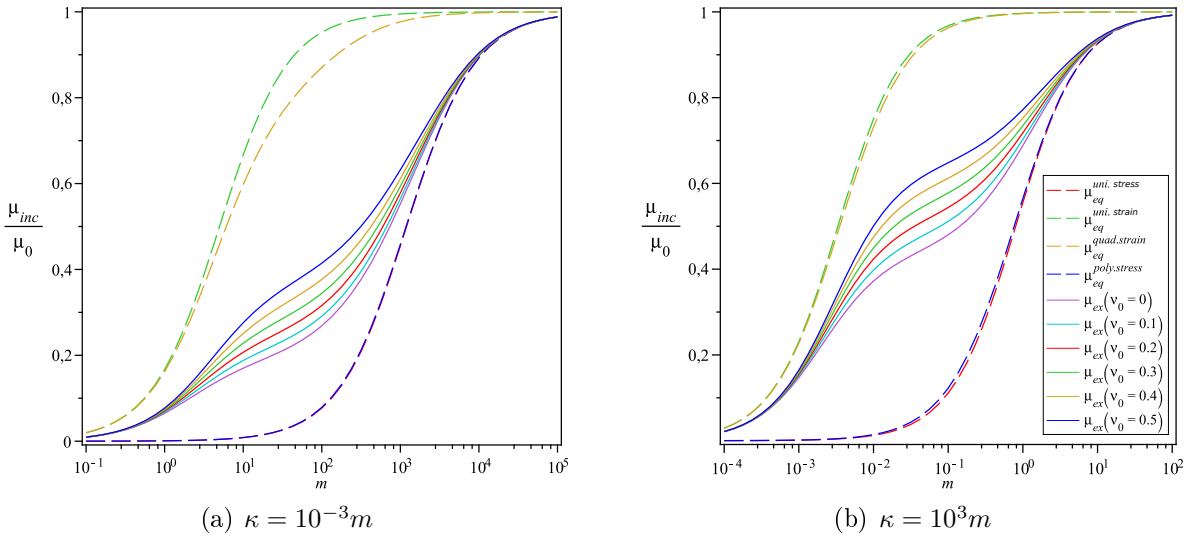


FIGURE 3.5 – Effet du coefficient de Poisson sur la précision des approches dans la détermination d'un module de cisaillement équivalent - $f = 0.3$

3.3 Composite granulaire à inclusions ellipsoïdales allongées et effets d'interface

Dans cette section, les approches énergétiques précédentes sont adaptées au cas d'inclusions ellipsoïdales de révolution allongées (sphéroïde prolata). L'objectif visé est la modélisation des matériaux granulaires poreux à inclusions ellipsoïdales présentant des effets d'interface (cas des gels de C-S-H). Ces approches ont été testées dans le cas d'inclusions sphériques (section 3.2.3). Elles permettront, dans le cas ellipsoïdal, d'obtenir des rigidités équivalentes qui ne pourront pas être comparées à une solution exacte puisqu'il n'en existe pas pour cette morphologie inclusionnaire. En revanche, ces rigidités équivalentes permettront de borner la rigidité équivalente réelle. Leur validité sera examinée en observant l'écart entre la borne supérieure et inférieure.

3.3.1 Considérations géométriques

En vue d'évaluer les expressions énergétiques mises en jeu dans les approches décrites précédemment, on devra définir un système de coordonnées local orthonormé décrivant la surface de l'inclusion ellipsoïdale, dans lequel les quantités tensorielles ainsi que les intégrales surfaciques pourront être exprimées. Une surface et un volume élémentaires devront également être définis. L'équation d'une surface ellipsoïdale dans les coordonnées cartésiennes est donnée par :

$$(E) : \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1 \quad (3.34)$$

L'ellipsoïde est considéré de révolution (sphéroïde) autour de l'axe \underline{u}_3 si dans l'équation (3.34) $b = a$. Il est qualifié d'oblate lorsque le rapport d'aspect $\omega = \frac{c}{a} < 1$, de prolata lorsque $\omega > 1$ et se réduit à une sphère lorsque $\omega = 1$ (fig.3.6).

Dans la suite de ce chapitre, la forme sphéroïdale prolata sera adoptée pour les inclusions solides.

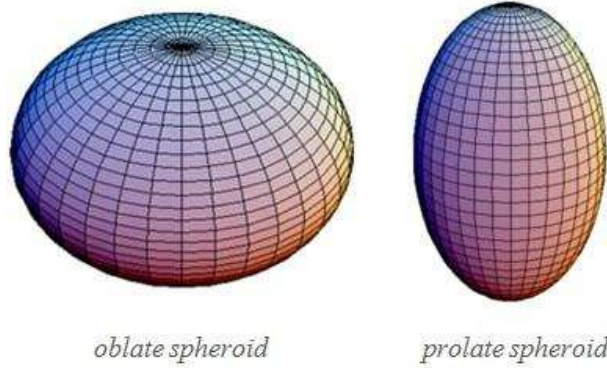


FIGURE 3.6 – Forme de l'inclusion en fonction du rapport d'aspect

Une base locale orthonormée

Un vecteur normal à la surface sphéroïdale peut être obtenu en appliquant le gradient à l'équation de l'ellipsoïde (3.34). Ceci nous donne, après normalisation, le premier vecteur \underline{n} de la base locale :

$$\underline{n} = A^{-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \frac{x}{a^2} \\ \frac{y}{a^2} \\ \frac{z}{c^2} \end{pmatrix} ; A = \frac{x^2 c^4 + y^2 c^4 + z^2 a^4}{c^4 a^4} \quad (3.35)$$

Les deux autres vecteurs constituant la base sont dans le plan tangent à la surface (orthogonal à \underline{n}). Le produit vectoriel de \underline{n} par un vecteur arbitraire, par exemple $\underline{e}_1 = (1, 0, 0)$, donne l'un de ces deux vecteurs du plan tangent \underline{t}_1 :

$$\underline{t}_1 = A_1^{-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{z}{c^2} \\ \frac{y}{a^2} \end{pmatrix} ; A_1 = \frac{z^2 a^4 + y^2 c^4}{c^4 a^4} \quad (3.36)$$

Le second vecteur \underline{t}_2 est orthogonal à \underline{n} et à \underline{t}_1 et s'obtient par le produit vectoriel de ces deux vecteurs :

$$\underline{t}_2 = A_2^{-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \frac{z^2 a^4 + y^2 c^4}{c^4 a^4} \\ -\frac{xy}{a^4} \\ -\frac{xy}{a^2 c^2} \end{pmatrix} ; A_2 = \frac{(y^4 + x^2 y^2) c^8 + z^2 a^4 (2y^2 + x^2) c^4 + z^4 a^8}{c^8 a^8} \quad (3.37)$$

$(\underline{n}, \underline{t}_1, \underline{t}_2)$ est maintenant une base locale orthonormée de la surface de l'inclusion.

Une surface élémentaire

Une paramétrisation de l'équation de l'ellipsoïde (3.34) à l'aide des coordonnées sphériques (r, θ, ϕ) selon l'équation (3.38), permet d'obtenir une surface et un volume élémentaires sous la forme (3.39).

$$\begin{cases} x(r, \theta, \phi) = ar \sin \theta \cos \phi \\ y(r, \theta, \phi) = ar \sin \theta \sin \phi \\ z(r, \theta, \phi) = cr \cos \theta \end{cases} \quad (3.38)$$

$$dS = a \sin \theta \sqrt{c^2 \sin^2 \theta + a^2 \cos^2 \theta} d\theta d\phi \quad (3.39)$$

$$dV = a^2 \sin \theta r^2 c dr d\theta d\phi$$

Les paramètres r , θ et ϕ parcourent successivement les intervalles $[0, 1]$, $[0, \pi]$ et $[0, 2\pi]$ pour décrire une intégration sur le volume total de l'inclusion. Les quantités à intégrer doivent être préalablement exprimées en fonction des coordonnées sphériques au lieu de x , y et z .

3.3.2 Approches énergétiques donnant des inclusions équivalentes

La mise en œuvre des quatre approches pour des inclusions ellipsoïdales fait appel au même raisonnement que dans le cas des inclusions sphériques. Dans cette section

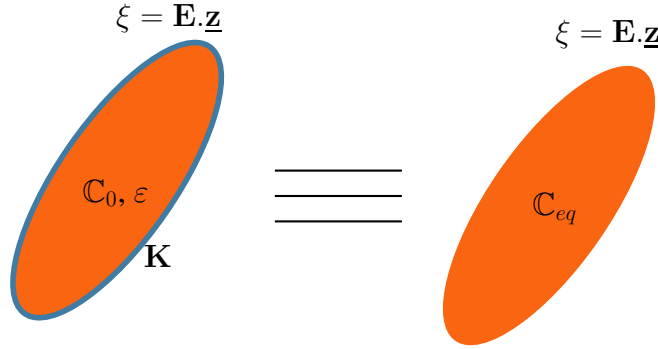


FIGURE 3.7 – Equivalence entre l'inclusion ellipsoïdale avec interface et une inclusion homogène de même forme

nous reprenons les deux premières approches pour montrer la différence entre les deux cas, notamment dans la manière d'aboutir à une rigidité équivalente. Nous déterminerons également pour ces deux premières approches, des expressions simplifiées des composantes de la rigidité équivalente dans le cas où le rapport d'aspect est très grand. Les résultats des deux secondes approches ne seront présentés que numériquement lors de la comparaison.

Approche à déformation uniforme

Comme dans le cas sphérique, le but est d'établir une équivalence énergétique entre l'inclusion ellipsoïdale avec interface et une inclusion homogène équivalente de même géométrie. Toutes les deux sont soumises au même chargement en déformation homogène aux bords (fig.3.7). Ceci requiert la détermination du champ de déformation microscopique préalablement inconnu.

Le champ de déformation microscopique ε est déterminé par minimisation de l'énergie potentielle donnée par l'équation (3.7). Dans cette expression, le tenseur de rigidité d'interface \mathbf{K} s'écrit désormais dans la base locale définie en section 3.3.1 :

$$\mathbf{K} = K_n \underline{\mathbf{n}} \otimes \underline{\mathbf{n}} + K_t (\underline{\mathbf{t}}_1 \otimes \underline{\mathbf{t}}_1 + \underline{\mathbf{t}}_2 \otimes \underline{\mathbf{t}}_2) \quad (3.40)$$

Les composantes de ε obtenues par cette minimisation (equation 3.8) sont introduites

dans l'expression de l'énergie (3.7). L'expression de l'énergie minimisée obtenue de cette manière est particulièrement intéressante puisqu'elle se met sous la forme isotrope transverse suivante :

$$E_p^{I.T} = \frac{1}{2}(C_{1111}E_{11}^2 + 2E_{11}C_{1122}E_{22} + 2E_{11}C_{1133}E_{33} + 2E_{12}^2C_{1111} - 2E_{12}^2C_{1122} + 4E_{13}^2C_{2323} + C_{1111}E_{22}^2 + 2E_{22}C_{1133}E_{33} + 4E_{23}^2C_{2323} + C_{3333}E_{33}^2) \quad (3.41)$$

On peut alors facilement déterminer les composantes non nulles d'une rigidité isotrope transverse "équivalente" qui donne une énergie potentielle de la forme (3.41) :

$$C_{1111}^{eq} = \frac{\partial^2 E_p}{\partial E_{11}^2}; \quad C_{1122}^{eq} = \frac{\partial^2 E_p}{\partial E_{11} \partial E_{22}}; \quad C_{1133}^{eq} = \frac{\partial^2 E_p}{\partial E_{11} \partial E_{33}}; \quad (3.42)$$

$$C_{3333}^{eq} = \frac{\partial^2 E_p}{\partial E_{33}^2}; \quad C_{2323}^{eq} = \frac{1}{4} \frac{\partial^2 E_p}{\partial E_{23}^2}$$

Les expressions générales de ces composantes sont assez lourdes et ne peuvent être reportées dans ce manuscrit. Elles sont, en revanche, tout à fait exploitables numériquement et se réduisent dans le cas d'un grand rapport d'aspect aux expressions simplifiées suivantes :

$$C_{1111}^{eq} = \frac{9\pi(27m^3\pi + (36\pi\chi + 576 + 27\kappa\pi)m^2 + (192\chi + 36\pi\kappa\chi + 192\kappa)m + 64\kappa\chi)}{(192m + 64\chi + 27m\pi\chi)(9\kappa\pi + 128 + 9m\pi)}\mu_0$$

$$C_{1122}^{eq} = \frac{9\pi(27m^3\pi - (18\pi\chi - 192 - 27\kappa\pi)m^2 - (18\pi\kappa\chi - 64\chi + 192\kappa)m - 64\kappa\chi)}{(192m + 64\chi + 27m\pi\chi)(9\kappa\pi + 128 + 9m\pi)}\mu_0$$

$$C_{1133}^{eq} = \frac{-9(2\chi - 3m)m\pi}{192m + 64\chi + 27m\pi\chi}\mu_0$$

$$C_{3333}^{eq} = \frac{9m(3\pi m + 64 + 4\pi\chi)}{192m + 64\chi + 27m\pi\chi}\mu_0$$

$$C_{2323}^{eq} = \mu_0 \quad (3.43)$$

où χ , κ et m sont réécrits sous la forme suivante :

$$\chi = \frac{aK_n}{k_0}; \quad \kappa = \frac{aK_t}{\mu_0}; \quad m = \frac{aK_n}{\mu_0} \quad (3.44)$$

Approche à contrainte uniforme

Cette approche reprend le même raisonnement que pour le cas des inclusions sphériques. L'expression de l'énergie complémentaire (3.17) est la même. Elle est optimisée par rapport aux composantes de la contrainte microscopiques avant d'être identifiée avec l'expression de l'opposée de l'énergie potentielle équivalente isotrope transverse (3.41). Cette identification permet de déduire les composantes de la rigidité équivalente conformément à (3.42) où E_p est remplacée par $(-E_c)$. Les expressions de ces composantes sont lourdes et ne peuvent être reportées dans ce manuscrit. Cependant, comme dans l'approche qui précède, on peut obtenir des expressions simplifiées dans le cas limite où le rapport d'aspect est très grand $\omega \gg 1$:

$$\begin{aligned}
C_{1111}^{eq} &= \frac{4}{3} \frac{(9\kappa\pi\chi + 3m\pi\chi + 9\pi m^2 + 27m\pi\kappa + 32\kappa m\chi + 24m^2\kappa)m}{(\pi\chi + 3m\pi + 4m\chi)(8\kappa m + 3\kappa\pi + 3m\pi)} \mu_0 \\
C_{1122}^{eq} &= \frac{4}{3} \frac{(-3\kappa\pi\chi + 3m\pi\chi + 9\pi m^2 - 9m\pi\kappa - 16\kappa m\chi + 24m^2\kappa)m}{(\pi\chi + 3m\pi + 4m\chi)(8\kappa m + 3\kappa\pi + 3m\pi)} \mu_0 \\
C_{1133}^{eq} &= \frac{-4}{3} \frac{m(2\chi - 3m)}{\pi\chi + 3m\pi + 4m\chi} \mu_0 \\
C_{3333}^{eq} &= \frac{1}{3} \frac{(27\pi + 16\chi + 12m)m}{\pi\chi + 3m\pi + 4m\chi} \mu_0 \\
C_{2323}^{eq} &= \frac{8\kappa}{8\kappa + 3\pi} \mu_0
\end{aligned} \tag{3.45}$$

Ces expressions analytiques simplifiées, comme celles de l'approche précédente, peuvent être très utiles pour prendre en compte l'effet d'interface dans les composites à fibres.

3.3.3 Comparaison des approches dans le cas ellipsoïdal

Dans cette section nous comparons les approches dans un cadre assez général indépendant de la microstructure. Pour ne pas comparer les composantes des rigidités équivalentes une à une, nous comparons les énergies potentielles développées par les inclusions équivalentes soumises à un chargement en déformation homogène aux bords (mêmes conditions

que celles utilisées pour l'équivalence énergétique (fig.3.7)). Le tenseur de déformation macroscopique est pris de la forme suivante :

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

De cette manière toutes les composantes de la rigidité équivalente d'une approche interviennent dans l'expression de l'énergie. La figure 3.8 montre les prédictions des approches pour cette énergie potentielle qu'on normalise par l'énergie potentielle sans effet d'interface : $\frac{E_p}{E_p^0}$. Cette quantité est tracée en fonction du paramètre d'interface m , pour différents ordres de grandeur du rapport κ/m . On peut noter que l'approche à contrainte polynomiale n'apporte presque aucune amélioration de la borne inférieure de l'énergie potentielle.

3.3.4 Modules homogénéisés du matériau granulaire à inclusions ellipsoïdales et effets d'interface : cas du gel de C-S-H

Dans cette section, nous mettons en œuvre le schéma auto-cohérent permettant d'homogénéiser la microstructure qu'on a choisie pour le gel de C-S-H. Nous rappelons que la microstructure du gel de C-S-H s'apparente à celle d'un matériau granulaire poreux dont les inclusions solides, de forme sphéroïdale prolata, selon certains auteurs, présentent un effet d'interface à leurs bords. Bien sûr on tirera profit des résultats des sections précédentes. Pour prendre en compte cet effet d'interface, on utilisera comme rigidité des inclusions solides une des rigidités équivalentes déterminées dans les sections précédentes. Ces rigidités sont isotropes transverses dans la base propre de l'inclusion ellipsoïdale (dans le plan $(\underline{u}_1, \underline{u}_2)$). L'orientation des inclusions doit être aléatoire puisque nous considérons le gel de C-S-H isotrope.

L'élaboration du schéma auto-cohérent requière la résolution de deux problèmes d'Eshelby

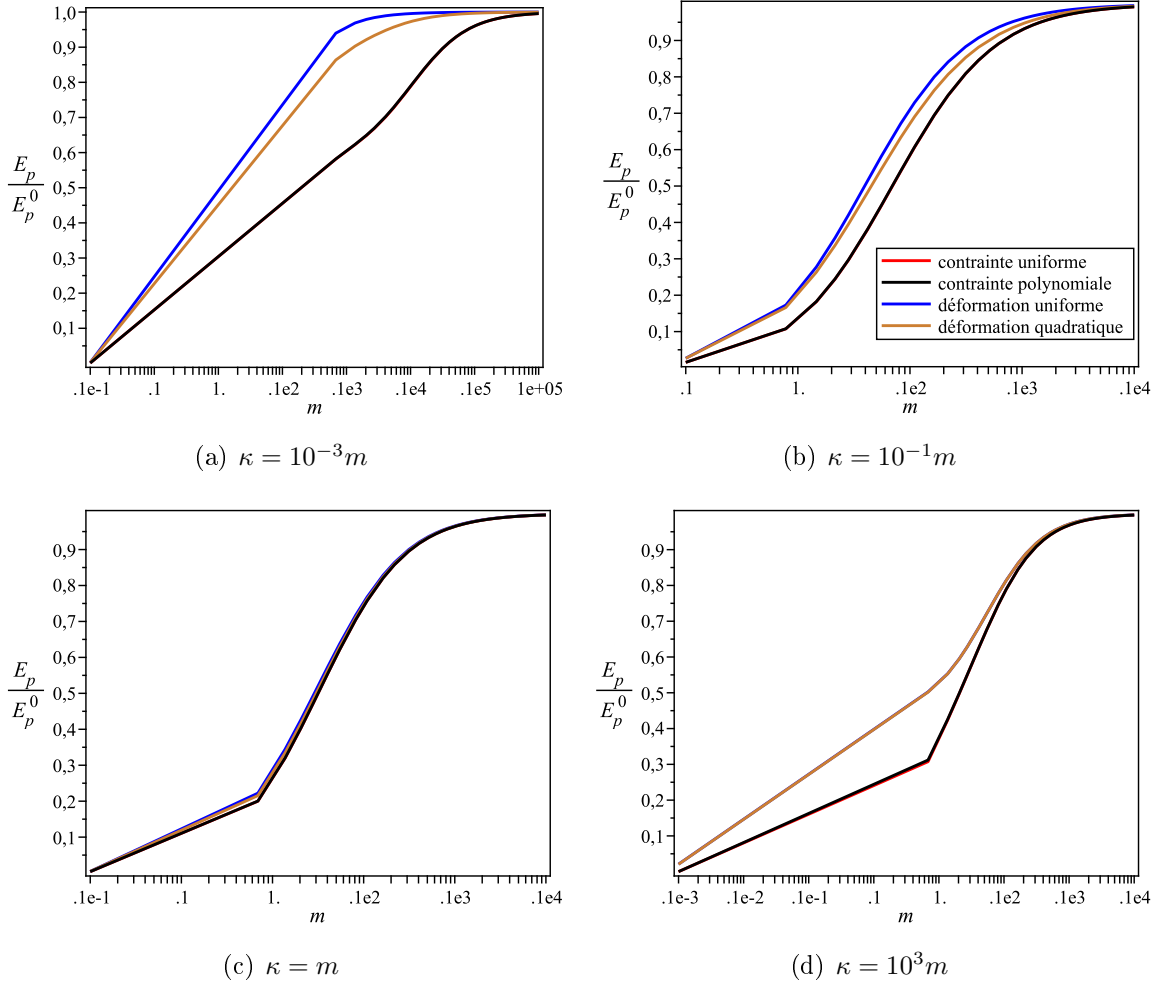


FIGURE 3.8 – Estimations de l'énergie potentielle de l'inclusion avec interface (normalisée par l'énergie potentielle sans effets d'interface) déterminées par les approches sous le chargement \mathbf{E} aux bords en fonction du paramètre d'interface m ($\omega = 2$)

dans lesquels chacune des inclusions est plongée dans une matrice infinie douée de la rigidité homogénéisée recherchée \mathbb{C}^{sc} . Cette matrice est soumise à l'infini à un chargement auxiliaire \mathbf{E}_0 . (fig.3.9) Le premier problème concerne le pore plongée dans la matrice infinie. La déformation moyenne dans le pore s'écrit en fonction de la déformation imposée à l'infini comme suit :

$$\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_p = \mathbb{A}_p : \mathbf{E}_0 \text{ avec } \mathbb{A}_p = (\mathbb{I} - \mathbb{P}_{sph}^{sc} : \mathbb{C}^{sc})^{-1} \quad (3.47)$$

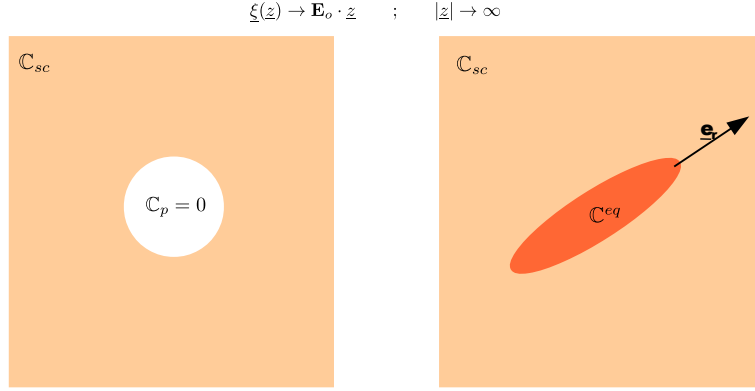


FIGURE 3.9 – Problèmes d'Eshelby pour le schéma auto-cohérent : l'inclusion ellipsoïdale est orientée par $\underline{e}_r(\theta, \phi)$

où \mathbb{P}_{sph}^{sc} est le tenseur de Hill d'une sphère dans un milieu isotrope de rigidité \mathbb{C}^{sc} .

Le deuxième problème considère l'inclusion solide sphéroïdale de rigidité $\mathbb{C}^s = \mathbb{C}_{eq}$ et dont l'axe est porté par \underline{e}_r permettant ainsi de paramétrer son orientation par les angles θ et ϕ des coordonnées sphériques. La moyenne de la déformation dans cette inclusion s'écrit en fonction du chargement auxiliaire imposé \mathbf{E}_0 comme suit :

$$\underline{\epsilon}_s(\theta, \phi) = [\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}(\theta, \phi) : (\mathbb{C}^s - \mathbb{C}^{sc})]^{-1} : \mathbf{E}_0 \quad (3.48)$$

où $\mathbb{P}_{ell}(\theta, \phi)$ est le tenseur de Hill d'une inclusion sphéroïdale orientée par (θ, ϕ) , plongée dans un milieu isotrope. Ce tenseur dépend de θ et ϕ , des modules homogénéisés k^{sc} et μ^{sc} et du rapport d'aspect de l'inclusion ω . Dans cette équation, $\mathbb{C}^s = \mathbb{C}^s(\theta, \phi)$ est anisotrope et dépend également de l'orientation (θ, ϕ) de l'inclusion. La phase solide contient un grand nombre de ces inclusions orientées de manière isotrope. La moyenne de la déformation sur cette phase peut être obtenue en prenant la moyenne de l'expression (3.48) sur toutes les orientations possibles :

$$\overline{\underline{\epsilon}}_s = \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \underline{\epsilon}_s(\theta, \phi) \frac{\sin \theta}{4\pi} d\theta d\phi \quad (3.49)$$

Cette déformation peut être mise sous la forme suivante en introduisant le tenseur de concentration de la déformation de la phase solide \mathbb{A}_s :

$$\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_s = \mathbb{A}_s : \mathbf{E}_0 \text{ avec } \mathbb{A}_s = \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \mathbb{A}_s' \frac{\sin\theta}{4\pi} d\theta d\phi \quad (3.50)$$

$$\text{et } \mathbb{A}_s' = [\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}(\theta, \phi) : (\mathbb{C}^s - \mathbb{C}^{sc})]^{-1}$$

On rappelle alors la règle de la moyenne sur les déformations ainsi que celle sur les contraintes qui font intervenir les tenseurs macroscopiques réellement appliqués au V.E.R \mathbf{E} et $\boldsymbol{\Sigma}$:

$$\begin{aligned} E = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} &= f \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle_p + (1-f) \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_s \\ \Sigma &= (1-f) \bar{\boldsymbol{\sigma}}_s = (1-f) \overline{\mathbb{C}^s : \boldsymbol{\varepsilon}_s} \end{aligned} \quad (3.51)$$

Et puisque la contrainte macroscopique et la déformation macroscopique sont reliées par la loi de Hooke, $\Sigma = \mathbb{C}^{sc} : \mathbf{E}$, on peut écrire que :

$$\mathbb{C}^{sc} : \mathbf{E} = (1-f) \overline{\mathbb{C}^s : \boldsymbol{\varepsilon}_s} \quad (3.52)$$

En vue de la règle de la moyenne et des équations (3.50) et (3.49) et on supposant les déformations microscopiques dans le matériau égales à celles des problèmes d'Eshelby, on peut exprimer le tenseur \mathbf{E} en fonction de \mathbf{E}_0 ce qui permet de réécrire l'équation (3.52) comme suit :

$$\mathbb{C}^{sc} : (f \mathbb{A}_p : \mathbf{E}_0 + (1-f) \mathbb{A}_s : \mathbf{E}_0) = (1-f) \overline{\mathbb{C}^s : \mathbb{A}_s' : \mathbf{E}_0} \quad (3.53)$$

qui permet de donner la rigidité homogénéisée, après élimination de \mathbf{E}_0 , sous la forme suivante :

$$\mathbb{C}^{sc} = (1-f) \overline{\mathbb{C}^s : \mathbb{A}_s'} : [f \mathbb{A}_p + (1-f) \mathbb{A}_s]^{-1} \quad (3.54)$$

ou sous la forme plus explicite suivante :

$$\begin{aligned} \mathbb{C}^{sc} &= (1-f) \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \mathbb{C}^s : [\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}(\theta, \phi) : (\mathbb{C}^s - \mathbb{C}^{sc})]^{-1} \frac{\sin\theta}{4\pi} d\theta d\phi \\ &: [f(\mathbb{I} - \mathbb{S}_{sph}^{sc})^{-1} + (1-f) \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} [\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}(\theta, \phi) : (\mathbb{C}^s - \mathbb{C}^{sc})]^{-1} \frac{\sin\theta}{4\pi} d\theta d\phi]^{-1} \end{aligned} \quad (3.55)$$

Dans cette dernière équation la rigidité homogénéisée intervient explicitement et implicitement dans l'expression des tenseurs de Hill. Une résolution analytique directe n'est pas envisageable, d'autant plus que les expressions des composantes de la rigidité de la phase solide (rigidité équivalente de l'une des approches) sont particulièrement lourdes. En revanche, une résolution numérique est tout à fait possible et facile à mettre en œuvre. En effet, puisque \mathbb{C}^{sc} est isotrope, les seules inconnues scalaires de l'équation 3.55 sont les modules homogénéisés k^{sc} et μ^{sc} . En observant que l'équation 3.55 est de la forme $\mathbb{C}^{sc} = f(\mathbb{C}^{sc})$, ou en termes de modules $(k^{sc}, \mu^{sc}) = f(k^{sc}, \mu^{sc})$, il est tentant d'essayer de la résoudre à l'aide d'un algorithme du point fixe. Pour que cet algorithme soit convergent, la fonction f doit être k -contractante avec $k < 1$. Cet algorithme de résolution couplé à la méthode d'inclusion équivalente (pour incorporer l'effet d'interface dans la rigidité de la phase solide), permet d'obtenir des bornes supérieure et inférieure des modules homogénéisés. La programmation de ces deux méthodes dans une procédure numérique nous permet d'étudier les modules homogénéisés en fonction du paramètre d'interface m pour plusieurs rapports κ/m (figures 3.10 et 3.11). L'approche en contrainte polynomiale n'est pas tracée puisqu'elle donne des courbes quasiment confondues avec l'approche en contrainte uniforme (conf. fig.3.1). Ces représentations des modules homogénéisés sont données pour un rapport d'aspect fixe.

Il nous est également possible d'observer l'effet du rapport d'aspect sur ces modules homogénéisés en comparant les courbes d'une même approche en fonction du module d'interface pour différents rapports d'aspect. L'approche choisie est celle en contrainte uniforme et les modules d'interface sont choisis égaux ($K_t = K_n$ ou $\kappa = m$) de manière à donner la meilleure estimation des modules exacts (fig. 3.12). Il est à remarquer à partir de ces courbes que le module d'interface agit sur l'ordre des modules homogénéisés trouvés avec les différents rapports d'aspects. L'ordre initial présenté dans le chapitre 1 (fig.1.3), pour des inclusions sans interfaces, est retrouvé sur ces courbes pour les valeurs élevées de κ . Il est important de souligner que les modules homogénéisés trouvés avec un rapport d'aspect $\omega = 1$ ne sont plus les plus faibles (mis à part pour les grands κ). Notons également que pour les inclusions prolates l'ordre des courbes est le même (mo-

dules homogénéisés toujours croissants en fonction de ω), Alors que pour les inclusions oblates l'ordre semble s'inverser au niveau des paliers des courbes (modules croissants en fonction de ω en dessous d'une certaine valeur de κ , correspondant au début du palier, et décroissant au delà de cette valeur). Ces remarques sont à prendre en compte lorsqu'il est question d'optimiser les propriétés élastiques de matériaux granulaires avec interfaces.

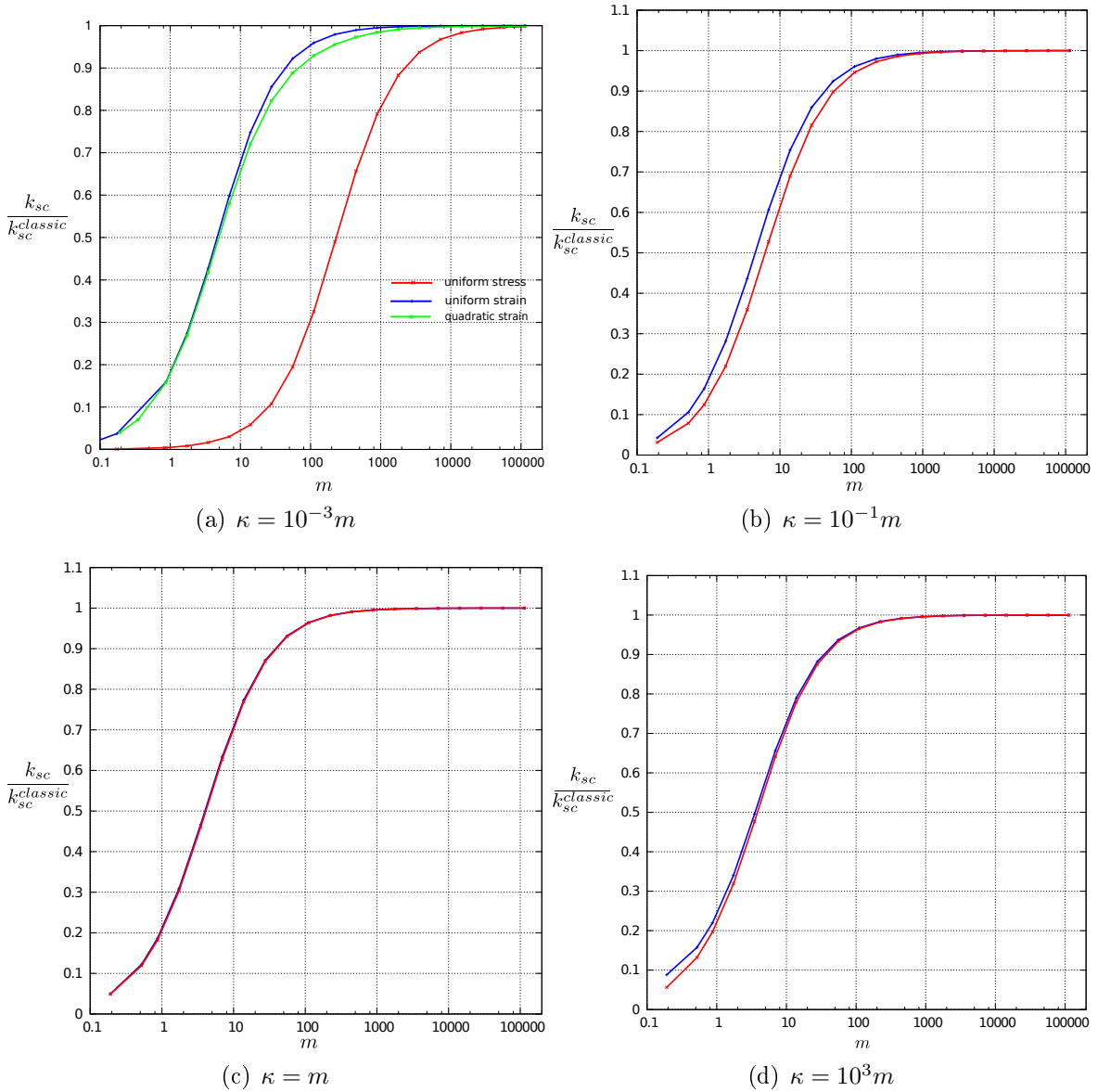


FIGURE 3.10 – Comparaison des approches dans la prédiction du module de compression homogénéisé prenant en compte l'effet d'interface pour une porosité $f = 0.3$ et un rapport d'aspect $\omega = 2$

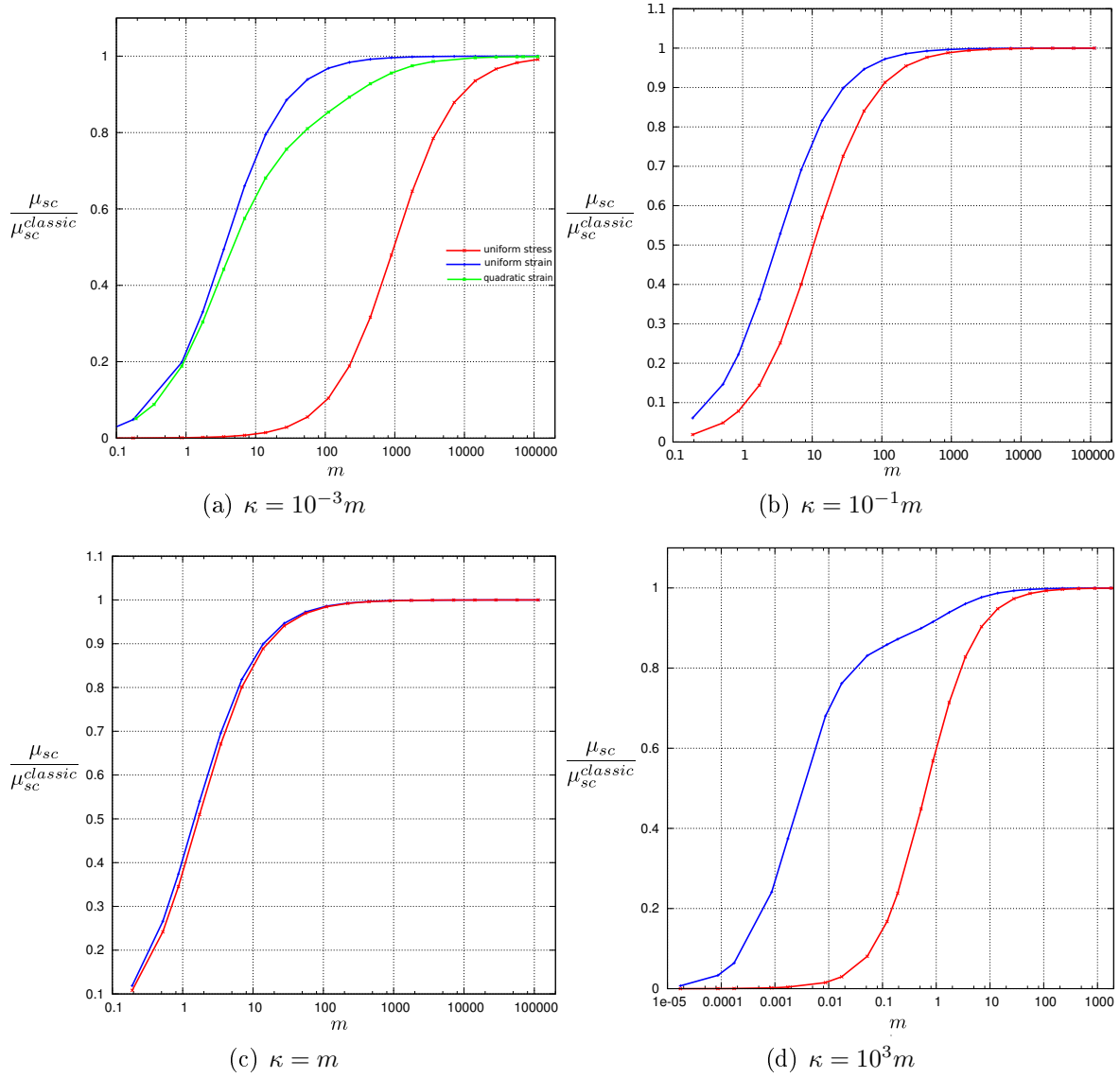


FIGURE 3.11 – Comparaison des approches dans la prédiction du module de cisaillement homogénéisé prenant en compte l'effet d'interface pour une porosité $f = 0.3$ et un rapport d'aspect $\omega = 2$

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons développé une méthode énergétique d'inclusion équivalente dans le but de prendre en compte les effets d'interface dans les propriétés élastiques des inclusions sphériques et ellipsoïdales. On a pu distinguer quatre variantes de cette

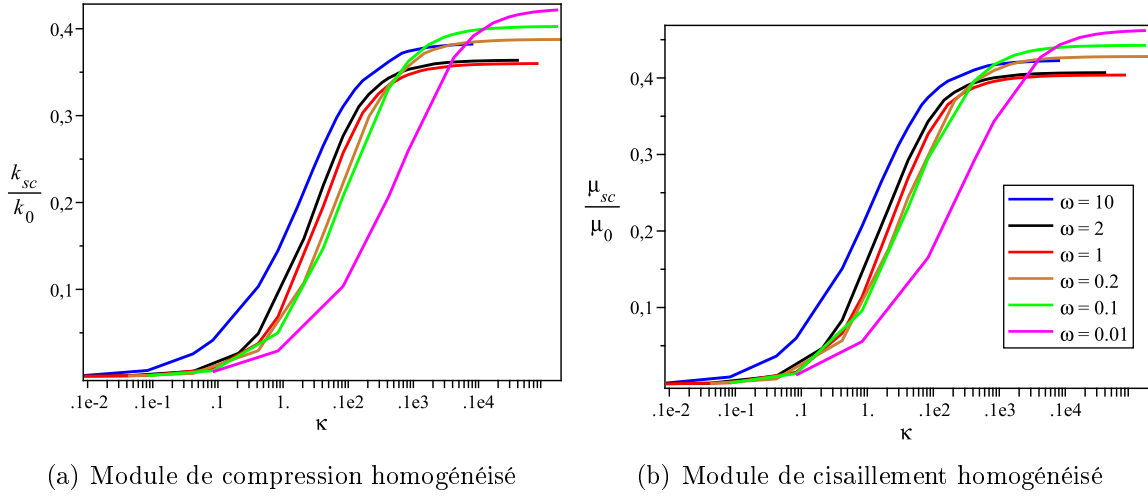


FIGURE 3.12 – Modules homogénéisés en fonction du module d'interface pour des rapports d'aspect différents ($K_t = K_n$, $f = 0, 3$)

méthode d'inclusion équivalente. Ces variantes (ou approches), qui diffèrent par la nature (déformation ou contrainte) et la forme (uniforme, quadratique ou polynomiale) du champ microscopique recherché du cœur de l'inclusion, ont donné des inclusion équivalentes. Ces inclusions équivalentes, munies de rigidités équivalentes, se substituent aux inclusions avec interface dans les schémas d'homogénéisation. Les quatre approches ont tout d'abord été menées pour le cas d'inclusion de forme sphérique. L'existence d'un modèle élastique "exact" dans la littérature (section 3.2.1), donnant les modules effectifs d'un matériaux granulaire à inclusions sphériques et interfaces, a permis d'étudier la validité de ces approches à trois niveaux : au niveau des modules équivalents de l'inclusion, dans le cadre d'un problème d'Eshelby indépendant de la microstructure et dans le cadre d'une microstructure granulaire. Cette comparaison au modèle exact de la littérature, a donné lieu aux constatations et des résultats suivants :

- Les approches donnent des bornes supérieures (approches en déformation) et inférieures (approches en contraintes) des modules équivalents.
- La précision de ces bornes dépend du rapport des modules d'interface κ/m
- Le module de compression équivalent est déterminé de manière exacte
- Pour une microstructure granulaire, on a constaté que la précision des approches

dépendait, en plus du rapport κ/m , de la porosité du milieu et du coefficient de Poisson du cœur de l'inclusion.

- On peut également conclure que l'approche en contrainte uniforme donne une bonne approximation (borne inférieure) du module de cisaillement exact et que l'approche à contrainte polynomiale ne permet pas de l'améliorer significativement. En revanche l'approche en déformation quadratique permet d'améliorer nettement la borne supérieure par rapport à l'approche en déformation uniforme.

L'extension des approches énergétique au cas d'inclusions ellipsoïdales a permis d'obtenir des inclusions ellipsoïdales avec des rigidités équivalentes isotropes transverses. Ces inclusions ont été utilisées pour déterminer les modules homogénéisés d'un matériau granulaire poreux avec inclusions allongées susceptible d'intervenir dans la microstructure du gel de C-S-H. L'influence du rapport d'aspect des inclusions sur les modules homogénéisés a été étudiée. Elle a permis de montrer des différences remarquables par rapport au cas sans interfaces. Les différences remarquées peuvent être utiles lors de l'optimisation des propriétés élastiques de tels matériaux dotés de propriétés d'interface données. Leur origine doit être explorée d'avantage.

* *

*

Chapitre 4

Rupture fragile des matériaux granulaires à inclusions allongées sous effets d'interface : cas des gels de C-S-H

Résumé : Dans ce chapitre on se propose d'adapter une méthode de changement d'échelle, existant dans la littérature, à une microstructure constituée de polycristal à inclusions ellipsoïdales pour en étudier la rupture fragile. Cette rupture est censée se produire localement par un glissement inter-granulaire par exemple. Pour explorer ce mode de rupture, nous supposons les corps de grains infiniment résistants devant les interfaces qui les entourent. Plusieurs critères locaux portant sur l'état de contrainte dans les interfaces sont envisagés. Différentes méthodes de calcul permettant de mettre en œuvre la méthode de changement d'échelle et de remonter au critère homogénéisé seront appliquées. Ce critère est en particulier étudié en 3D pour explorer sa dépendance vis à vis du troisième invariant de la contrainte.

Sommaire

4.1	Introduction	87
4.2	Critères de rupture locaux dans les interfaces	88
4.3	Méthode de changement d'échelle	88
4.4	Méthodes de calcul pour la mise en œuvre de la méthode de changement d'échelle	92
4.4.1	Méthode semi-numérique : différentiation du schéma auto-cohérent	93
4.4.2	Méthode de calcul direct avec « isotropisation » pour le calcul des tenseurs de Hill	99

4.4.3	Méthode analytique basée sur un schéma dilué généralisé	101
4.5	Comparaison des méthodes - Détermination des critères homogénéisés	105
4.5.1	Comparaison sur les termes recherchés	106
4.5.2	Critères homogénéisés	108
4.6	Critère 3D et dépendance du troisième invariant : une ébauche .	113
4.7	Conclusion	121

4.1 Introduction

La rupture des matériaux granulaires intéresse plusieurs auteurs et a fait l'objet de nombreux travaux de recherches récents [Maalej et al., 2009]. Dans ces travaux, des hypothèses sont généralement émises sur la forme des grains ou sur le mode de rupture local pour obtenir plus facilement des critères de rupture homogénéisés. Parmi ces hypothèses on peut citer celle qui considère des grains sphériques pour une microstructure qui ne s'y prête pas ou celle qui considère que la rupture se produit dans les grains (rupture intra-granulaire) au lieu d'une rupture inter-granulaire. Ces hypothèses simplificatrices, traduisant une description peu réaliste de la microstructure et du mécanisme de rupture locale, peuvent conduire à de grossières approximations sur le critère de rupture homogénéisé du matériau. Dans le chapitre précédent, on s'est donné les moyens d'étudier ce type de matériau en gardant une description fidèle de la microstructure pour déterminer les propriétés élastiques homogénéisés d'un matériau granulaire avec inclusions allongées en prenant en compte les effets d'interface. Les résultats obtenus seront mis à profit pour étudier, dans ce chapitre, la rupture fragile d'un V.E.R de ce matériau soumis à un chargement macroscopique croissant. On suppose que cette rupture se traduit localement par un glissement entre les grains (dans les interfaces) ou par un autre mode de rupture dans les interfaces. Le mode de rupture par glissement inter-granulaire a déjà été étudié pour des matériaux granulaires à inclusions sphériques dans le travail de [Maalej et al., 2009]. Nous adapterons la méthode de changement d'échelle utilisée dans ce travail aux matériaux granulaires à inclusions ellipsoïdales. Ensuite nous la mettrons en œuvre à l'aide de trois méthodes de calcul différentes. Ces méthodes nous permettront de remonter au critère de rupture homogénéisé du matériau (gel de C-S-H). Pour finir, nous généraliserons une des trois méthodes de calcul pour tracer le critère homogénéisé en 3D et pour étudier sa dépendance vis à vis du troisième invariant de la contrainte macroscopique.

4.2 Critères de rupture locaux dans les interfaces

On considère un V.E.R d'une microstructure granulaire avec inclusions ellipsoïdales et interfaces (microstructure choisie pour modéliser le gel de C-S-H), auquel on applique un chargement macroscopique homogène en contrainte **axisymétrique** de tenseur Σ (pour modéliser un essai de compression uniaxiale avec ou sans pression de confinement). Cette contrainte macroscopique est reprise, au niveau du cœur de grain par une contrainte microscopique et au niveau de l'interface de grain par un vecteur contrainte noté \underline{T} . Le cœur de grain est considéré infiniment résistant et par conséquent la connaissance de la contrainte microscopique y régnant n'est pas essentielle. En revanche le vecteur contrainte dans l'interface est déterminant pour définir un critère de rupture locale. Ce vecteur n'est pas nécessairement homogène sur l'interface d'un grain. A priori, il est également variable d'une interface à l'autre. Ses composantes, normale et tangentielle, sont respectivement notées T_n et T_t . Les critères de rupture locaux que nous envisageons (de Von Mises, elliptique ou rectangulaire dans l'interface) portent uniquement sur ces composantes ou, pour être plus précis, sur leurs moyennes quadratiques $\sqrt{T_t^2}$ et $\sqrt{T_n^2}$. Les expressions de ces critères de l'interface sont résumées dans le tableau (4.1). On considère qu'ils sont atteints dans l'interface d'un grain, sous chargement macroscopique croissant, dès lors que les inégalités du tableau deviennent des égalités. Comme on se place dans le cadre d'une rupture fragile, on considère que la rupture de tout le V.E.R est à son tour atteinte lorsque l'interface de l'un des grains atteint son critère de rupture. Puisque on cherche à déterminer le critère de rupture du V.E.R sous un chargement macroscopique, il est nécessaire de passer par une méthode de changement d'échelle qui permet de relier l'état de contrainte locale (dans les interfaces) à ce chargement macroscopique.

4.3 Méthode de changement d'échelle

Dans cette section nous utilisons la méthode de changement d'échelle de [Maalej et al., 2009] qu'on adapte au cas d'un matériau granulaire à inclusions ellipsoïdales. Cette méthode nous permet de relier les moyennes des composantes du vecteur

TABLEAU 4.1 – Expressions des critères de ruptures dans l'interface

Critères	expressions
Von Mises	$\sqrt{\overline{T_t^2}(\theta)} < T_{cr}$
Critère elliptique	$\frac{\overline{T_n^2}(\theta)}{\alpha^2} + \frac{\overline{T_t^2}(\theta)}{\beta^2} < 1$
Critère rectangulaire	$\sqrt{\overline{T_n^2}(\theta)} < T_{ncr}$ et $\sqrt{\overline{T_t^2}(\theta)} < T_{tcr}$

contrainte au chargement macroscopique. Le développement de la méthode pour des inclusions sphériques dans le travail de [Maalej et al., 2009] est entièrement analytique à cause de l'invariance de l'état de contrainte d'une interface à l'autre. Dans notre cas, l'état de contrainte microscopique (le vecteur contrainte dans l'interface) n'est à priori pas le même sur toutes les interfaces de grains du VER. La méthode de [Maalej et al., 2009] ne peut donc pas être appliquée comme telle. En revanche, vu la symétrie du chargement macroscopique considéré (axisymétrique), il est naturel que l'on peut définir des familles d'inclusions pour lesquelles l'état de contrainte est sensiblement le même dans toutes les interfaces d'une même famille. Chaque famille I_r est repérée par son orientation (colatitude θ_r) vis à vis de l'axe de symétrie du chargement macroscopique (\underline{e}_3). La démarche de [Maalej et al., 2009] peut être adaptée pour déterminer une estimation des moyennes des composantes du vecteur contrainte dans les interfaces d'une famille donnée.

Pour un grain donné, le vecteur contrainte n'est pas homogène sur sa frontière. Il est nul en dehors des surfaces de contact du grain avec les grains avoisinants (l'interface). Ainsi, les moyennes quadratiques de ses composantes sur l'interface $\sqrt{\overline{T_t^2}}$ et $\sqrt{\overline{T_n^2}}$ sont reliées aux moyennes quadratiques sur les surfaces de contact du grain $\sqrt{\overline{T_t^{2s}}}$ et $\sqrt{\overline{T_n^{2s}}}$ par :

$$\begin{aligned}\overline{T_t^{2s}} &= \frac{1}{|\partial G_i^s|} \int_{\partial G_i^s} T_t^2 dS = \frac{1}{\chi} \overline{T_t^2} \\ \overline{T_n^{2s}} &= \frac{1}{|\partial G_i^s|} \int_{\partial G_i^s} T_n^2 dS = \frac{1}{\chi} \overline{T_n^2}\end{aligned}\tag{4.1}$$

avec ∂G_i est l'interface du grain G_i , ∂G_i^s sa restriction aux surfaces de contact et $|\partial G_i^s|$ et $|\partial G_i|$ les aires de ces surfaces. $\chi = \frac{|\partial G_i^s|}{|\partial G_i|}$ et représentera dans la suite le rapport moyen

des surfaces de contacts et surfaces totales des grains du VER.

Les termes évoqués dans $\overline{T_t^{2s}}$ et $\overline{T_t^2}$ ne sont que les carrées des moyennes quadratiques des composantes.

D'autre part, dans le cas élastique linéaire, l'énergie élastique, par unité de volume, emmagasinée dans le VER Ω est donnée par [Maalej et al., 2009] :

$$W = \frac{1}{2|\Omega|} \sum_i \left(\int_{G_i} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C}_0 : \boldsymbol{\varepsilon} dV + \int_{\partial G_i^s} \underline{T} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \underline{T} dS \right) \quad (4.2)$$

Cette énergie implique donc une sommation sur toutes les interfaces de grains contenus dans le VER de volume $|\Omega|$. On considère une famille d'inclusions I_R repérée par une orientation unique θ_R . La dérivation de l'expression (4.2) par rapport à K_{tR}^{-1} ou K_{nR}^{-1} , inverses des modules tangentiel et normal des interfaces de la famille I_R , donne :

$$\frac{\partial W}{\partial K_{tR}^{-1}} = \frac{1}{2|\Omega|} \sum_{i \in I_R} \left[2 \int_{G_i} \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial K_{tR}^{-1}} : \mathbb{C}_0 : \boldsymbol{\varepsilon} dV + \int_{\partial G_i^s} T_t^2 dS + 2 \int_{\partial G_i^s} \frac{\partial \underline{T}}{\partial K_{tR}^{-1}} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \underline{T} dS \right]$$

et

$$\frac{\partial W}{\partial K_{nR}^{-1}} = \frac{1}{2|\Omega|} \sum_{i \in I_R} \left[2 \int_{G_i} \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial K_{nR}^{-1}} : \mathbb{C}_0 : \boldsymbol{\varepsilon} dV + \int_{\partial G_i^s} T_n^2 dS + 2 \int_{\partial G_i^s} \frac{\partial \underline{T}}{\partial K_{nR}^{-1}} \cdot \mathbf{K}^{-1} \cdot \underline{T} dS \right] \quad (4.3)$$

Ces deux expressions peuvent être réécrites comme suit :

$$\frac{\partial W}{\partial K_{tR}^{-1}} = \frac{1}{2|\Omega|} \sum_{i \in I_R} \left[2 \int_{G_i} \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial K_{tR}^{-1}} : \boldsymbol{\sigma} dV + \int_{\partial G_i^s} T_t^2 dS + 2 \int_{\partial G_i^s} \frac{\partial \underline{T}}{\partial K_{tR}^{-1}} \cdot \llbracket \underline{\xi} \rrbracket dS \right]$$

et

$$\frac{\partial W}{\partial K_{nR}^{-1}} = \frac{1}{2|\Omega|} \sum_{i \in I_R} \left[2 \int_{G_i} \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial K_{nR}^{-1}} : \boldsymbol{\sigma} dV + \int_{\partial G_i^s} T_n^2 dS + 2 \int_{\partial G_i^s} \frac{\partial \underline{T}}{\partial K_{nR}^{-1}} \cdot \llbracket \underline{\xi} \rrbracket dS \right] \quad (4.4)$$

où $\llbracket \underline{\xi} \rrbracket = \xi^+ - \xi^-$ est la discontinuité du déplacement à la traversée de l'interface de grain. Comme le champ de contrainte microscopique σ , associé au vecteur contrainte \underline{T} ,

est statiquement admissible avec le champ de contrainte macroscopique Σ , il s'en suit que $\frac{\partial \sigma}{\partial K_{tR}^{-1}}$ (respectivement $\frac{\partial \sigma}{\partial K_{nR}^{-1}}$), associé au vecteur contrainte $\frac{\partial \underline{T}}{\partial K_{tR}^{-1}}$ (respectivement $\frac{\partial \underline{T}}{\partial K_{nR}^{-1}}$), est statiquement admissible avec $\frac{\partial \Sigma}{\partial K_{tR}^{-1}} = \mathbf{0}$ (respectivement $\frac{\partial \Sigma}{\partial K_{nR}^{-1}} = \mathbf{0}$). Ceci donne en vertu du lemme de Hill que le premier et le troisième terme des expressions de (4.4) s'annulent [Maalej et al., 2009]. Ainsi les équations de (4.4) deviennent :

$$\frac{\partial W}{\partial K_{tR}^{-1}} = \frac{1}{2|\Omega|} \sum_{i \in I_R} \int_{\partial G_i^s} T_t^2 dS = \frac{1}{2|\Omega|} \sum_{i \in I_R} \frac{|\partial G_i^s|}{2|\Omega|} \frac{1}{|\partial G_i^s|} \int_{\partial G_i^s} T_t^2 dS$$

(4.5)

et

$$\frac{\partial W}{\partial K_{nR}^{-1}} = \frac{1}{2|\Omega|} \sum_{i \in I_R} \int_{\partial G_i^s} T_n^2 dS = \frac{1}{2|\Omega|} \sum_{i \in I_R} \frac{|\partial G_i^s|}{2|\Omega|} \frac{1}{|\partial G_i^s|} \int_{\partial G_i^s} T_n^2 dS$$

En supposant que les contributions des grains d'une même famille d'inclusions I_R sont égales, les dernières quantités peuvent être approchées par :

$$\frac{\partial W}{\partial K_{tR}^{-1}} = \frac{N_R |\partial G^s|}{2|\Omega|} \overline{T_{tR}^{2s}}$$

$$\frac{\partial W}{\partial K_{nR}^{-1}} = \frac{N_R |\partial G^s|}{2|\Omega|} \overline{T_{nR}^{2s}}$$

(4.6)

où $|\partial G^s|$ est la surface de contact entre grains en moyenne, N_R le nombre d'inclusions de la famille I_R orientée par θ_R .

D'autre part, on peut exprimer l'énergie du VER macroscopiquement, sous des conditions aux bords homogènes en contrainte, de la manière suivante :

$$W = \frac{1}{2} \Sigma : \mathbb{C}_H^{-1} : \Sigma$$

(4.7)

où $\mathbb{C}(\theta, \phi)_H$ est le tenseur de rigidité homogénéisée et Σ le tenseur de contrainte macroscopique axisymétrique imposé au VER.

La dérivation de l'expression (4.7) par rapport à K_{tR}^{-1} et K_{nR}^{-1} donne :

$$\begin{aligned}\frac{\partial W}{\partial K_{tR}^{-1}} &= \frac{1}{2} \Sigma : \frac{\partial \mathbb{C}_H^{-1}}{\partial K_{tR}^{-1}} : \Sigma \\ \frac{\partial W}{\partial K_{nR}^{-1}} &= \frac{1}{2} \Sigma : \frac{\partial \mathbb{C}_H^{-1}}{\partial K_{nR}^{-1}} : \Sigma\end{aligned}\tag{4.8}$$

Ainsi en identifiant les deux expressions de la dérivée de l'énergie (4.6) et (4.8), on obtient les expressions des moyennes quadratiques des composantes, tangentielle et normale, du vecteur contrainte dans les interfaces de la famille I_R :

$$\begin{aligned}\overline{T}_{tR}^{2s} &= \frac{2|\Omega|K_{tR}^2}{N_R|\partial G^s|} \Sigma : \frac{\partial \mathbb{C}_H^{-1}}{\partial K_{tR}^{-1}} : \Sigma = \frac{2|\Omega|}{N_R|\partial G^s|} \Sigma : \mathbb{C}_H^{-1} : \frac{\partial \mathbb{C}_H}{\partial K_{tR}} : \mathbb{C}_H^{-1} : \Sigma \\ \overline{T}_{nR}^{2s} &= \frac{2|\Omega|K_{nR}^2}{N_R|\partial G^s|} \Sigma : \frac{\partial \mathbb{C}_H^{-1}}{\partial K_{nR}^{-1}} : \Sigma = \frac{2|\Omega|}{N_R|\partial G^s|} \Sigma : \mathbb{C}_H^{-1} : \frac{\partial \mathbb{C}_H}{\partial K_{nR}} : \mathbb{C}_H^{-1} : \Sigma\end{aligned}\tag{4.9}$$

Ainsi les termes à déterminer pour obtenir ces moyennes des composantes tangentielles du vecteur contrainte sont $\frac{\partial \mathbb{C}_H^{-1}}{\partial K_{tR}^{-1}}$ et $\frac{\partial \mathbb{C}_H^{-1}}{\partial K_{nR}^{-1}}$ ou bien $\frac{\partial \mathbb{C}_H}{\partial K_{tR}}$ et $\frac{\partial \mathbb{C}_H}{\partial K_{nR}}$. Ces termes représentent la variation de la rigidité homogénéisée due à la variation de la rigidité des inclusions solides équivalentes d'une famille I_R , elle même due à la variation du module d'interface K_t (ou K_n) d'un dK_t (ou dK_n) infinitésimal, uniquement pour les interfaces de la famille I_R . En effet la variation des modules d'interface conduit à une variation des rigidités équivalentes des inclusions de la famille et donc à une variation de la rigidité homogénéisée. Dans ce qui suit nous envisageons plusieurs méthodes de calcul de ces termes dans le but de les comparer et d'en valider les résultats.

4.4 Méthodes de calcul pour la mise en œuvre de la méthode de changement d'échelle

Dans cette section, on présente trois méthodes de calcul des dérivées $\partial \mathbb{C}_H / \partial K_{tR}$ et $\partial \mathbb{C}_H / \partial K_{nR}$: Une méthode numérique issue de la différentiation du schéma auto-cohérent, une deuxième méthode numérique de calcul direct simplifié et une troisième méthode

analytique qui utilise le schéma dilué généralisé. Les développements analytiques ou numériques utilisés pour le calcul des deux dérivées sont à peu près les mêmes. Ils ne seront donc présentés qu'une seule fois. En effet, comme cité plus haut la variation de l'un des modules d'interface produit une variation de la rigidité équivalente des inclusions solides qui résulte en une variation de la rigidité homogénéisée. Le calcul de cette variation de rigidité homogénéisée due à une variation de la rigidité d'une famille d'inclusions est donc commun aux calculs des deux dérivées.

4.4.1 Méthode semi-numérique : différentiation du schéma auto-cohérent

Dans ce qui suit, nous décrivons une méthode semi-numérique servant au calcul des deux dérivées. Les développements théoriques conduisant à la mise en œuvre d'une procédure semi-numérique seront présentés.

Différentiation du schéma auto-cohérent

Les termes recherchés font intervenir le tenseur rigidité homogénéisée \mathbb{C}_H d'un matériau granulaire poreux à inclusions solides ellipsoïdales. Toutes les inclusions sont identiques à une rotation près. On note $\mathbb{P}_{el}^H(\theta, \phi)$ le tenseur de Hill attaché à une inclusion ellipsoïdale de révolution dont l'axe est défini par les angles θ et ϕ . Le tenseur \mathbb{C}_H est donné par la résolution de l'équation suivante, équivalente à (3.55), issue de la modélisation par schéma auto-cohérent de ce matériau au chapitre 3 :

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_H : & \left\{ (1-f) \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} [\mathbb{I} + \mathbb{P}_{el}^H(\theta, \phi) : (\mathbb{C}_r(\theta, \phi) - \mathbb{C}_H)]^{-1} \frac{\sin \theta}{4\pi} d\theta d\phi + f (\mathbb{I} - \mathbb{P}_{sph}^H : \mathbb{C}_H)^{-1} \right\} \\ & = \left\{ (1-f) \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} \mathbb{C}_r(\theta, \phi) : [\mathbb{I} + \mathbb{P}_{el}^H(\theta, \phi) : (\mathbb{C}_r(\theta, \phi) - \mathbb{C}_H)]^{-1} \frac{\sin \theta}{4\pi} d\theta d\phi \right\} \end{aligned} \quad (4.10)$$

Rappelons que f désigne la porosité. la répartition des orientations des inclusions est uniforme. La discrétisation des intégrales selon θ uniquement donne :

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_H : & \left[(1-f) \sum_{\theta_r} \int_{\phi=0}^{2\pi} (\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}^H(\theta_r, \phi) : \delta \mathbb{C}_H)^{-1} \frac{\sin \theta_r}{4\pi} \Delta \theta d\phi + (f(\mathbb{I} - \mathbb{P}_{sph}^H : \mathbb{C}_H)^{-1}) \right] \\ & = \left[(1-f) \sum_{\theta_r} \int_{\phi=0}^{2\pi} \mathbb{C}_r(\theta_r, \phi) : (\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}^H(\theta_r, \phi) : \delta \mathbb{C}_H)^{-1} \frac{\sin \theta_r}{4\pi} \Delta \theta d\phi \right] \end{aligned} \quad (4.11)$$

où $\delta \mathbb{C}_H = \mathbb{C}_r(\theta_r, \phi) - \mathbb{C}_H$ et $\Delta \theta$ est le pas de discrétisation de $[0, \pi]$.

La variation de K_{tR} ou K_{nR} , pour une seule famille d'inclusions d'orientation θ_R (numériquement cette famille est d'orientation comprise dans l'intervalle $[\theta_R - \Delta \theta/2, \theta_R + \Delta \theta/2]$), produit une variation de la rigidité \mathbb{C}_R des inclusions de cette famille. Cette variation produit à son tour une variation de la rigidité homogénéisée. Ainsi, si on fixe un incrément dK_{tR} ou un dK_{nR} , la différentiation du membre de droite de l'équation (4.11) donne :

$$\begin{aligned} & \left[(1-f) \sum_{\theta_r \neq \theta_R} \int_{\phi=0}^{2\pi} \mathbb{C}_r : d(\mathbb{I} + \mathbb{P}_r^H : (\mathbb{C}_r - \mathbb{C}_H))^{-1} \frac{\sin \theta_r}{4\pi} \Delta \theta d\phi \right] + \\ & \left[(1-f) \sum_{\theta_r = \theta_R, \pi - \theta_R} \int_{\phi=0}^{2\pi} d\mathbb{C}_R : (\mathbb{I} + \mathbb{P}_R^H : (\mathbb{C}_R - \mathbb{C}_H))^{-1} \frac{\sin \theta_r}{4\pi} \Delta \theta d\phi \right] \end{aligned} \quad (4.12)$$

Où $\mathbb{C}_r, \mathbb{C}_R, \mathbb{P}_r^H$ et \mathbb{P}_R^H désignent les tenseurs $\mathbb{C}_r(\theta_r, \phi), \mathbb{C}_R(\theta_R, \phi), \mathbb{P}_{ell}^H(\theta_r, \phi)$ et $\mathbb{P}_{ell}^H(\theta_R, \phi)$. Dans cette dernière équation, la famille orientée par θ_R (famille de référence) est la seule à avoir une rigidité qui varie, à cause de la variation de l'un de ses modules d'interface. La deuxième sommation porte sur θ_R et $\pi - \theta_R$ car ces deux orientations font partie de la même famille I_R .

Les termes tensoriels de cette dernière équation sont explicités ci-dessous :

$$d(\mathbb{I} + \mathbb{P}_r : \delta \mathbb{C})^{-1} = -(\mathbb{I} + \mathbb{P}_r : \delta \mathbb{C})^{-1} : d(\mathbb{P}_r : \delta \mathbb{C}) : (\mathbb{I} + \mathbb{P}_r : \delta \mathbb{C})^{-1} \quad (4.13)$$

Le terme $d(\mathbb{P}_r : \delta \mathbb{C})$ ne s'écrit pas de la même manière selon que $r = R$ ou $r \neq R$. En effet :

- si $r \neq R$ on a $d(\mathbb{P}_r : \delta \mathbb{C}) = d\mathbb{P}_r : \delta \mathbb{C} - \mathbb{P}_r : d\mathbb{C}_H$

- si $r = R$ on a $d(\mathbb{P}_r : \delta\mathbb{C}) = d\mathbb{P}_R : \delta\mathbb{C} + \mathbb{P}_R : (d\mathbb{C}_R - d\mathbb{C}_H)$

Que $r = R$ ou $r \neq R$, notons que \mathbb{P}_r dépend de K_{tR} (resp. K_{nR}) via $\mathbb{C}_{\mathbb{H}}$. On s'intéresse maintenant à la différentiation du membre de gauche de l'équation (4.11) qui donne :

$$\begin{aligned} d\mathbb{C}_H : & \left[(1-f) \sum_{\theta_r} \int_{\phi=0}^{2\pi} (\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}^H(\theta_r, \phi) : (\mathbb{C}_r(\theta_r, \phi) - \mathbb{C}_H))^{-1} \frac{\sin \theta_r}{4\pi} \Delta \theta d\phi + (f(\mathbb{I} - \mathbb{S}_{sph}^H)^{-1}) \right] \\ + \mathbb{C}_H : & \left[(1-f) \sum_{\theta_r} \int_{\phi=0}^{2\pi} d(\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}^H(\theta_r, \phi) : (\mathbb{C}_r(\theta_r, \phi) - \mathbb{C}_H))^{-1} \frac{\sin \theta_r}{4\pi} \Delta \theta d\phi + d(f(\mathbb{I} - \mathbb{S}_{sph}^H)^{-1}) \right] \end{aligned} \quad (4.14)$$

où \mathbb{P}_s remplace la notation P_{sph}^H pour désigner le tenseur de Hill des pores

$$d(\mathbb{I} - \mathbb{P}_s : \mathbb{C}_H)^{-1} = -(\mathbb{I} - \mathbb{P}_s : \mathbb{C}_H)^{-1} : d(\mathbb{P}_s : \mathbb{C}_H) : (\mathbb{I} - \mathbb{P}_s : \mathbb{C}_H)^{-1} \quad (4.15)$$

et

$$d(\mathbb{P}_s : \mathbb{C}_H) = d\mathbb{P}_s : \mathbb{C}_H + \mathbb{P}_s : d\mathbb{C}_H \quad (4.16)$$

De la différentiation des deux membres (équations 4.12 et 4.14), de nouveaux termes tensoriels différenciés apparaissent : $d\mathbb{C}_R$ variation de la rigidité de la famille d'inclusions de référence, $d\mathbb{C}_H$ variation de la rigidité homogénéisée (terme recherché), $d\mathbb{P}_R$, $d\mathbb{P}_s$, $d\mathbb{P}_s$ variations des tenseurs de Hill, respectivement, de la famille de référence, des autres familles d'inclusions solides et des pores sphériques. Le calcul des variations des tenseurs de Hill est particulièrement délicat. Il est présenté en détail dans ce qui suit.

Variation des tenseurs de Hill

Dans ce paragraphe, nous présentons la méthode utilisée pour déterminer la variation des tenseurs de Hill des inclusions ellipsoïdales uniquement. Celle des inclusions sphériques lui est similaire. Nous montrerons la différence qui existe entre les deux calculs. Dans le cadre du schéma auto-cohérent, le milieu de référence (matrice dans les problèmes d'Eshelby) est le milieu homogénéisé. Nous cherchons donc la variation que peut subir le tenseur de Hill d'une inclusion ellipsoïdale placée dans un milieu infini entre l'état initial

où le milieu infini est de rigidité isotrope \mathbb{C}_H et l'état où cette rigidité a subi une variation isotrope transverse $d\mathbb{C}_H$. Nous faisons ici l'hypothèse que cette variation de la rigidité homogénéisée est isotrope transverse. Cette hypothèse est parfaitement justifiable. En effet, la famille d'inclusion dont la rigidité varie est repérée par une colatitude constante $\theta = \theta_R$ avec une longitude ϕ qui varie dans $[0, 2\pi]$. Les rigidités des inclusions de cette famille sont isotropes transverses (déterminées par la méthode d'inclusion équivalente, conf. Chapitre 3). Les variations de ces rigidités pour un incrément de K_t ou K_n sont également isotropes transverses. Ceci donne, vu la symétrie de révolution de la famille autour de l'axe \underline{e}_3 , une variation isotrope transverse selon \underline{e}_3 de la rigidité homogénéisée (fig.4.2).

Les développements qui suivent s'appuient sur la relation suivante (voir par exemple [Castañeda, 2005]) :

$$\mathbb{P}_r = \frac{\det(\mathbf{Z}_r)}{4\pi} \int_{|\underline{\xi}|=1} \mathbb{H}^{(0)}(\underline{\xi}) |\mathbf{Z}_r \cdot \underline{\xi}|^{-3} dS \quad (4.17)$$

\mathbf{Z}_r représente ici le tenseur de forme (d'ordre 2) de l'ellipsoïde « prolate » représentant l'inclusion. Ce tenseur s'exprime de manière assez simple dans sa base propre de l'ellipsoïde ($\underline{u}_1, \underline{u}_2, \underline{u}_3$) (voir fig.4.1) par :

$$\mathbf{Z}_r = \underline{u}_1 \otimes \underline{u}_1 + \underline{u}_2 \otimes \underline{u}_2 + \omega \underline{u}_3 \otimes \underline{u}_3 \quad (4.18)$$

ω étant le rapport d'aspect de l'ellipsoïde (qui vaut 1 pour les sphères). L'axe de symétrie de l'inclusion est suivant \underline{u}_3 (également axe d'isotropie transverse). Dans l'équation (4.17), $\underline{\xi}$ représente un vecteur sur la sphère unité et l'intégrale de surface sur $|\underline{\xi}| = 1$ n'est autre que l'intégrale de surface sur la sphère unité.

Dans cette même équation, $\mathbb{H}^{(0)}$ représente un tenseur d'ordre 4 défini, en fonction du tenseur $\mathbf{K}^{(0)}$ (défini plus bas) et du vecteur $\underline{\xi}$, par le double produit tensoriel suivant :

$$H_{ijpq}^{(0)}(\underline{\xi}) = [\xi_i [\mathbf{K}^{(0)}(\underline{\xi})]_{jp}^{-1} \xi_q]_{(ij)(pq)} \quad (4.19)$$

Quant au tenseur $\mathbf{K}^{(0)}$ (tenseur acoustique), il s'exprime à l'aide du tenseur de rigidité de la matrice dans laquelle est plongée l'inclusion ellipsoïdale (la rigidité homogénéisée

dans le cas du schéma auto-cohérent) :

$$K_{ik}^{(0)}(\xi) = C_{ijkl}^{(0)} \xi_j \xi_l \quad (4.20)$$

Ainsi comme on veut calculer la variation du tenseur de Hill due à la variation de \mathbb{C}_H d'un tenseur infinitésimal $d\mathbb{C}_H$ isotrope transverse selon \underline{e}_3 , on remplace dans les trois équations précédentes $\mathbb{C}^{(0)}$ par $\mathbb{C}_H + \lambda d\mathbb{C}_H$. Les calculs sont faits en gardant le coefficient en λ uniquement après avoir effectué des développements limités des composantes de $d\mathbb{H}^{(0)}$ autour de $\lambda = 0$. Ces calculs sont entièrement menés dans la base locale de l'ellipsoïde. Ainsi, le tenseur $\mathbb{C}_H + \lambda d\mathbb{C}_H$, dont l'expression est simple dans la base du VER, est exprimé dans la base de l'ellipsoïde et inséré dans l'équation (4.20) à la place de $\mathbb{C}^{(0)}$ pour donner désormais le tenseur $d\mathbf{K}$ dont les composantes sont calculées comme suit :

$$dK_{ik}(\xi) = (C_H + \lambda dC_H)_{ijkl} \xi_j \xi_l \quad (4.21)$$

La différentiation de l'équation (4.19) donne l'expression d'un tenseur qu'on notera $d\mathbf{H}$ et dont les composantes seront données par :

$$dH_{ijpq}(\underline{\xi}) = [\xi_i d[\mathbf{K}(\underline{\xi})]_{jp}^{-1} \xi_q]_{(ij)(pq)} \quad (4.22)$$

où le tenseur $d[\mathbf{K}]^{-1}$ n'est autre que la différentiation du tenseur $[\mathbf{K}^{(0)}]^{-1}$ et se calcule comme suit :

$$d[\mathbf{K}]^{-1} = -[\mathbf{K}^{(0)}]^{-1} \cdot d\mathbf{K} \cdot [\mathbf{K}^{(0)}]^{-1} \quad (4.23)$$

$d\mathbf{K}$ étant donné par (4.21) et $\mathbf{K}^{(0)}$ par (4.20) en y remplaçant $\mathbf{C}^{(0)}$ par \mathbf{C}_H .

Une fois calculé, le tenseur $d\mathbb{H}$ est utilisé dans l'expression suivante donnant $d\mathbb{P}_r$:

$$d\mathbb{P}_r = \frac{\det(\mathbf{Z}_r)}{4\pi} \int_{|\underline{\xi}|=1} d\mathbb{H}(\underline{\xi}) |\mathbf{Z}_r \cdot \underline{\xi}|^{-3} dS \quad (4.24)$$

Le raisonnement est exactement le même pour la variation du tenseur de Hill des pores sphériques. Comme la forme des inclusions est isotrope dans ce cas, aucune orientation n'est à prendre en compte. Les calculs ci-dessus peuvent être alors menés de manière totalement analytique alors qu'ils sont en partie numériques pour l'ellipsoïde. Les termes tensoriels impliqués dans cette méthode semi-numérique peuvent donc tous être implémentés

en fonction des cinq modules du tenseur isotrope transverse $d\mathbb{C}_H$ (dC_{1111} , dC_{1122} , dC_{1133} , dC_{3333} , dC_{2323}) gardées sous forme littérale dans les calculs). Ces composantes sont ensuite déterminées en résolvant cinq équations linéaires indépendantes issues de l'identification du terme de gauche avec le terme de droite (équations 4.12 et 4.14).

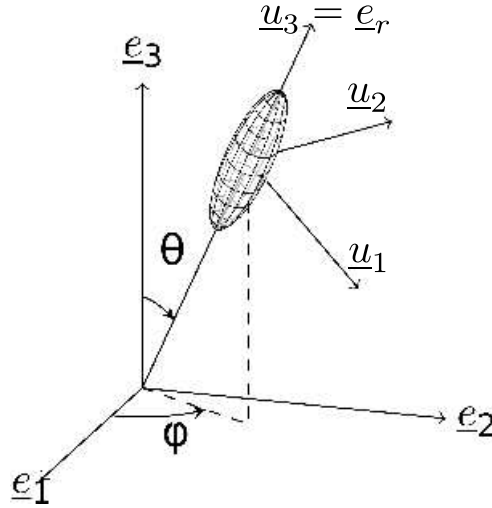


FIGURE 4.1 – Base propre de l'ellipsoïde par rapport à la base fixe liée au V.E.R

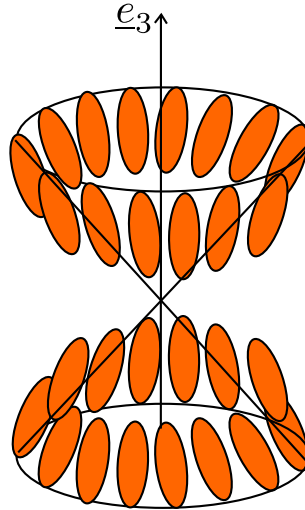


FIGURE 4.2 – Symétrie (autour de \underline{e}_3) d'une famille d'inclusions de même orientation et de même état de contrainte (disposition en double cône)

4.4.2 Méthode de calcul direct avec « isotropisation » pour le calcul des tenseurs de Hill

Dans cette section nous essayons de développer une deuxième méthode basée sur un calcul direct du schéma auto-cohérent, dans le but de valider les résultats de la première et de comparer l'efficacité des deux méthodes.

principe de la méthode

Dans cette deuxième méthode on a recours à deux schémas auto-cohérents pour modéliser deux configurations différentes de la microstructure du matériau granulaire. Le premier schéma décrit la configuration initiale pour laquelle toutes les inclusions solides ont la même rigidité dans leurs bases propres. Ce schéma permet d'obtenir la rigidité homogénéisée comme solution de l'équation (4.10) qui est résolue par un algorithme du point fixe comme au chapitre 3 section 3.3.4. La rigidité homogénéisée obtenue est bien évidemment isotrope en dépit de l'isotropie transverse de la rigidité des inclusions, puisque leurs orientations sont équiprobables. Le deuxième schéma auto-cohérent décrit la configuration perturbée. Dans cette configuration toutes les inclusions gardent la même rigidité sauf une seule famille d'inclusions repérée par son orientation θ_R . Pour cette famille la rigidité est perturbée d'un $d\mathbb{C}_R$ dû à la perturbation d'un de ses modules d'interface (d'un dK_{tR} ou dK_{nR}). Dans ce qui suit, nous expliquons la méthode numérique que nous utilisons pour résoudre ce deuxième schéma auto-cohérent et déterminer la rigidité homogénéisée perturbée. Une fois obtenue, celle-ci va nous permettre de calculer le tenseur $d\mathbb{C}_{hom}$ par différence avec la rigidité homogénéisée initiale.

Calcul de la rigidité perturbée par schéma auto-cohérent

Pour résoudre le deuxième schéma auto-cohérent la même démarche que pour le premier est utilisée. L'équation du chapitre 3 donnant la rigidité homogénéisée (3.55) tient toujours. Elle donne ici la rigidité homogénéisée \mathbb{C}_{per}^{sc} obtenue après perturbation de l'un

des modules d'interface de la famille I_R :

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_{per}^{sc} &= (1-f) \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \mathbb{C}_r : [\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}(\theta, \phi) : (\mathbb{C}_r - \mathbb{C}_{per}^{sc})]^{-1} \frac{\sin \theta}{4\pi} d\theta d\phi \\ &: [f(\mathbb{I} - \mathbb{S}_{sph}^{sc})^{-1} + (1-f) \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} [\mathbb{I} + \mathbb{P}_{ell}(\theta, \phi) : (\mathbb{C}_r - \mathbb{C}_{per}^{sc})]^{-1} \frac{\sin \theta}{4\pi} d\theta d\phi]^{-1} \end{aligned} \quad (4.25)$$

Cependant dans cette équation les rigidités des familles d'inclusions ne sont plus toutes égales (dans leurs bases propres). En effet une de ces familles a une rigidité perturbée. Une discrétisation de cette équation sur les orientations θ permet d'en tenir compte :

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_{per}^{sc} &= [(1-f) \sum_{\theta_r \neq \theta_R} \int_{\phi=0}^{2\pi} \mathbb{C}_r : [\mathbb{I} + \mathbb{P}_r : (\mathbb{C}_r - \mathbb{C}_{per}^{sc})]^{-1} d\phi \frac{\sin \theta_r}{4\pi} \Delta\theta \\ &+ (1-f) \sum_{\theta_r = \theta_R, \pi - \theta_R} \int_{\phi=0}^{2\pi} (\mathbb{C}_R + d\mathbb{C}_R) : [\mathbb{I} + \mathbb{P}_R : (\mathbb{C}_R + d\mathbb{C}_R - \mathbb{C}_{per}^{sc})]^{-1} d\phi \frac{\sin \theta_r}{4\pi} \Delta\theta] \\ &: [f(\mathbb{I} - \mathbb{S}_{sph}^{sc})^{-1} + (1-f) \sum_{\theta_r \neq \theta_R} \int_{\phi=0}^{2\pi} [\mathbb{I} + \mathbb{P}_r : (\mathbb{C}_r - \mathbb{C}^{sc})]^{-1} d\phi \frac{\sin \theta_r}{4\pi} \Delta\theta \\ &+ (1-f) \sum_{\theta_r = \theta_R, \pi - \theta_R} \int_{\phi=0}^{2\pi} [\mathbb{I} + \mathbb{P}_r : (\mathbb{C}_R + d\mathbb{C}_R - \mathbb{C}^{sc})]^{-1} d\phi \frac{\sin \theta_r}{4\pi} \Delta\theta]^{-1} \end{aligned} \quad (4.26)$$

où $\mathbb{P}_r = \mathbb{P}_{ell}(\theta_r, \phi)$ et $\mathbb{C}_r = \mathbb{C}(\theta_r, \phi)$, r pouvant être égal à R . $d\mathbb{C}_R = d\mathbb{C}_R(\phi)$ représente la perturbation subie par la rigidité des inclusions orientée par θ_R et ϕ due à la perturbation d'un de leur modules d'interface.

Dans cette dernière équation l'inconnue est \mathbb{C}_{per}^{sc} . On cherche à la résoudre par un algorithme itératif du point fixe. Le tenseur $\mathbb{P}_{ell}(\theta_r, \phi)$ qui y figure est le tenseur de Hill d'une inclusion ellipsoïdale plongée dans un milieu isotrope transverse dont la direction d'isotropie transverse n'est pas confondue avec l'axe de symétrie de l'inclusion. Nous ne disposons pas d'un moyen efficace et rapide permettant de calculer ce tenseur pour être utilisé dans un algorithme itératif. On pourrait s'orienter vers une procédure numérique de calcul des tenseurs de Hill dans des milieux anisotropes qui est disponible dans la litté-

rature [ref]. Cependant, le parti pris ici consiste à contourner ce problème nous calculons à chaque itération de l'algorithme itératif des tenseurs de Hill à partir d'une rigidité isotropisée. En d'autres termes, pour une itération i donnée de l'algorithme du point fixe, les tenseurs de Hill à calculer (y compris celui des pores) dépendent, entre autres, du tenseur \mathbb{C}_{i-1}^{sc} , obtenu à la fin de l'itération précédente. Ce tenseur est isotrope transverse. On peut déterminer un tenseur isotrope $\mathbb{C}_{i-1}^{sc,iso}$ qui est sa projection dans l'espace des tenseur isotropes : cela revient à évaluer des modules k_{i-1}^{sc} et μ_{i-1}^{sc} à partir de certaines des composantes de \mathbb{C}_{i-1}^{sc} . Ainsi le calcul des tenseurs de Hill en considérant cette nouvelle rigidité pour le milieu de référence devient assez simple. Le tenseur $\mathbb{C}_{i-1}^{sc,iso}$ sert uniquement au calcul des tenseurs de Hill de l'itération i . Il n'intervient pas dans les termes sommés de l'expression 4.26 lorsque \mathbb{C}_{per}^{sc} apparait explicitement. En effet pour ces termes, on utilise le tenseur "réel" de l'itération précédente \mathbb{C}_{i-1}^{sc} (isotrope transverse).

Il est à noter que de cette manière les tenseurs de Hill ne participent pas à rendre la rigidité homogénéisée isotrope transverse. Cette propriété est donc due uniquement à l'utilisation de rigidités isotropes transverses pour les inclusions et à la symétrie de révolution des familles d'inclusions. Pour finir les résultats des deux schémas auto-cohérents sont utilisés pour calculer les termes recherchés :

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbb{C}^{sc}}{dK_{tR}} &= \frac{\mathbb{C}_{per}^{sc} - \mathbb{C}_{iso}^{sc}}{dK_{tR}} \\ \frac{d\mathbb{C}^{sc}}{dK_{nR}} &= \frac{\mathbb{C}_{per}^{sc} - \mathbb{C}_{iso}^{sc}}{dK_{nR}} \end{aligned} \tag{4.27}$$

où dK_{tR} et dK_{nR} sont fixés au début de cette procédure numérique pour le calcul de $d\mathbb{C}_R$

4.4.3 Méthode analytique basée sur un schéma dilué généralisé

Dans cette section, nous essayons d'évaluer les termes $\partial\mathbb{C}_H/\partial K_{tR}$ et $\partial\mathbb{C}_H/\partial K_{nR}$ par une méthode de calcul plus simple que les deux premières. Cette méthode part du constat que la fraction volumique de la famille de référence I_R (dont la rigidité est perturbée) est

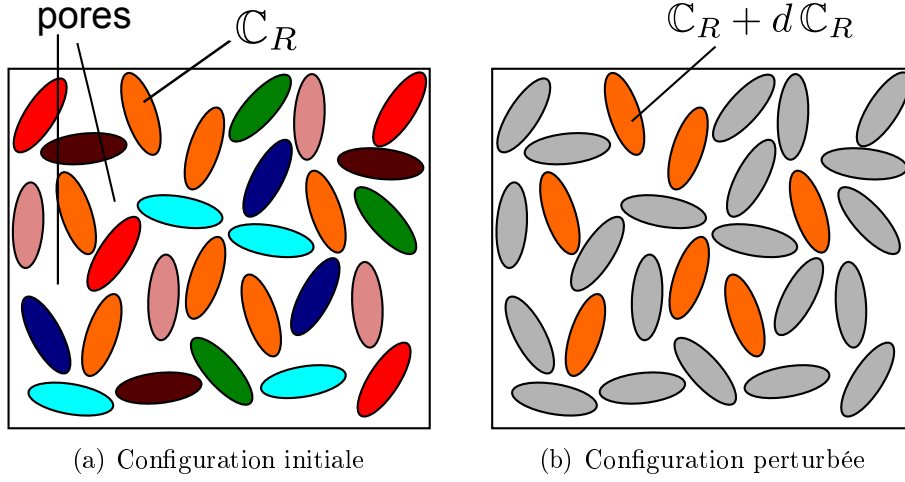


FIGURE 4.3 – Configuration initiale (premier schéma auto-cohérent) et perturbée (deuxième schéma auto-cohérent) pour le calcul direct des termes tensoriels

faible dans le milieu granulaire. En effet, celle ci vaut (fig.4.4) :

$$df_R = \frac{(1-f)dS}{S_{sph.unit}} = (1-f) \sin \theta d\theta \quad (4.28)$$

df_R est d'autant plus faible que $d\theta$ est petit. Les termes recherchés peuvent être donnés

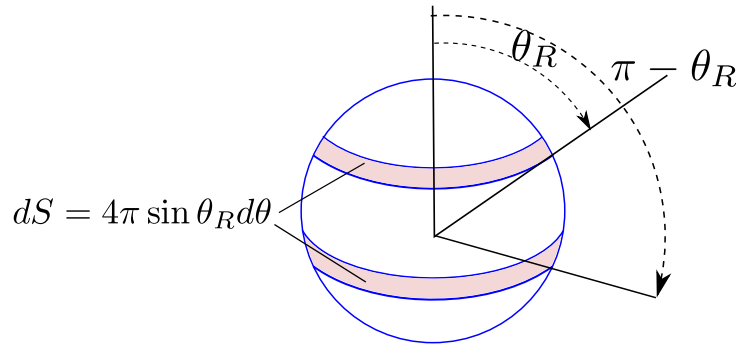


FIGURE 4.4 – Calcul de la fraction d'une famille - famille orientée par θ_R dans la sphère unité représentant toutes les orientations possibles

par les expressions suivantes, similaires à celles utilisées dans la section précédente :

$$\frac{\partial \mathbb{C}_H}{\partial K_{tR}} = \frac{1}{dK_{tR}} [\mathbb{C}_H(K_{tR} + dK_{tR}) - \mathbb{C}_H(K_{tR})]$$

$$\frac{\partial \mathbb{C}_H}{\partial K_{nR}} = \frac{1}{dK_{nR}} [\mathbb{C}_H(K_{nR} + dK_{nR}) - \mathbb{C}_H(K_{nR})]$$
(4.29)

dK_{nR} et dK_{tR} étant les variations des modules d'interface pour la famille d'inclusions I_R . On remarquera que la rigidité homogénéisée est à nouveau notée \mathbb{C}_H pour éviter la confusion avec les résultats des schémas auto-cohérents de la section précédente.

Comme cette famille est de fraction volumique infinitésimale, il est naturel de tenter d'évaluer les expressions de (4.29) dans le cadre (à définir) d'un schéma dilué. Comme dans la section précédente, deux configurations, faisant ici appel au schéma dilué, sont à prévoir (fig.4.5).

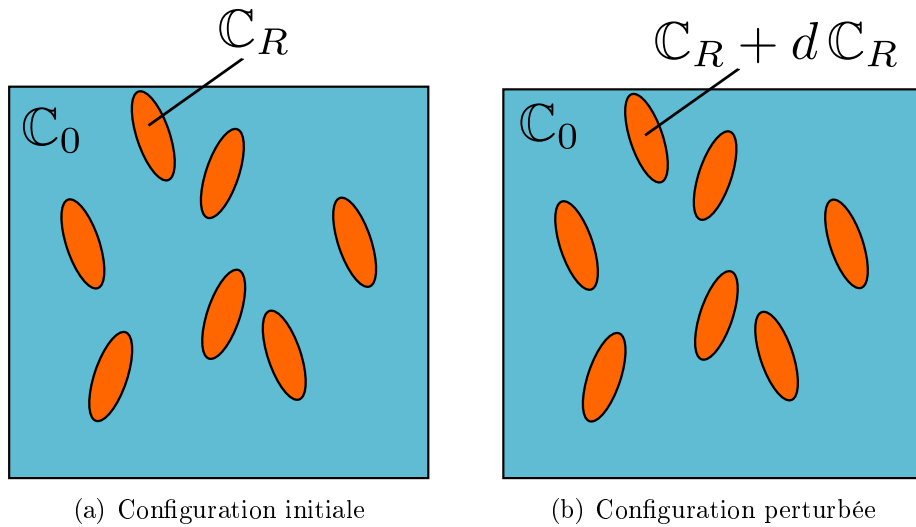


FIGURE 4.5 – Configuration initiale et perturbée pour le calcul des termes tensoriels par schéma dilué généralisé

Configuration initiale

La configuration initiale considère toutes les inclusions solides de même rigidité (à une rotation près). Le milieu granulaire de rigidité isotrope \mathbb{C}_H^{iso} peut alors être vu comme

l'homogénéisation d'un composite comportant une matrice fictive de rigidité \mathbb{C}_0 à déterminer et une phase inclusionnaire qui n'est autre que la famille I_R de fraction df_R . On a donc :

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_H^{iso} &= \mathbb{C}_0 + \frac{df_R}{2\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} \delta\mathbb{C}_0 : (\mathbb{I} + \mathbb{P}_0^{ell} : \delta\mathbb{C}_0)^{-1} d\phi \\ &\text{avec} \\ \delta\mathbb{C}_0 &= \mathbb{C}_R(\theta_R, \phi) - \mathbb{C}_0 \end{aligned} \tag{4.30}$$

où $\mathbb{C}_R(\theta_R, \phi)$ désigne la rigidité (équivalente) de la particule orientée selon (θ_R, ϕ) . Le tenseur de Hill \mathbb{P}_0^{ell} de l'ellipsoïde orienté selon (θ_R, ϕ) dépend également de \mathbb{C}_0 . Cependant la différence $\mathbb{C}_H^{iso} - \mathbb{C}_0$ est par construction du premier ordre en df_R . Il est donc possible de linéariser l'équation (4.30) en remplaçant \mathbb{P}_0^{ell} par le tenseur de Hill \mathbb{P}_H^{ell} du même ellipsoïde plongé dans le milieu isotrope de rigidité \mathbb{C}_H^{iso} . Pour la même raison, on pourra remplacer $\delta\mathbb{C}_0$ par $\delta\mathbb{C}_{iso} = \mathbb{C}_R(\theta_R, \phi) - \mathbb{C}_H^{iso}$. Dans ces conditions il devient possible de tirer de (4.30) le moyen de déterminer la rigidité \mathbb{C}_0 sous la forme :

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_0 &= \mathbb{C}_H^{iso} - \frac{df_R}{2\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} \delta\mathbb{C}_H : (\mathbb{I} + \mathbb{P}_H^{ell} : \delta\mathbb{C}_H)^{-1} d\phi \\ &\text{avec} \\ \delta\mathbb{C}_H &= \mathbb{C}_R(\theta_R, \phi) - \mathbb{C}_H^{iso} \end{aligned} \tag{4.31}$$

On note que le milieu en question (de tenseur \mathbb{C}_0) est isotrope transverse. \mathbb{C}_H^{iso} correspond à la rigidité du matériau granulaire à l'état initial, déterminée à l'aide du schéma auto-cohérent (section 4.4.2).

Configuration perturbée

Cette deuxième configuration correspond à l'état où la rigidité de la famille de référence $\mathbb{C}_R(\theta_R, \phi)$ est perturbée par un $d\mathbb{C}_R(\theta_R, \phi)$ due à la perturbation de l'un de ses modules d'interface. L'utilisation du schéma dilué de la section précédente avec le même milieu de référence dont la rigidité \mathbb{C}_0 a déjà été déterminée doit nous permettre d'obtenir

la rigidité homogénéisée perturbée :

$$\mathbb{C}_H^{iso} + d\mathbb{C}_H = \mathbb{C}_0 + \frac{df_R}{2\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} (\delta\mathbb{C}_H + d\mathbb{C}_R) : [\mathbb{I} + \mathbb{P}_H^{ell} : (\delta\mathbb{C}_H + d\mathbb{C}_R)]^{-1} d\phi$$

avec

(4.32)

$$\delta\mathbb{C}_H = \mathbb{C}_R(\theta_R, \phi) - \mathbb{C}_H^{iso}$$

Compte tenu de (4.31), le calcul de la différentielle selon $d\mathbb{C}_R$ dans (4.32) donne d'abord :

$$d\mathbb{C}_H = \frac{df_R}{2\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} (\mathbb{I} - \delta\mathbb{C}_H : \mathbb{A} : \mathbb{P}_H^{ell}) : d\mathbb{C}_R : \mathbb{A} d\phi \quad \text{avec } \mathbb{A} = (\mathbb{I} + \mathbb{P}_H^{ell} : \delta\mathbb{C}_H)^{-1} \quad (4.33)$$

En utilisant l'identité :

$$\mathbb{I} - \delta\mathbb{C}_H : \mathbb{A} : \mathbb{P}_H^{ell} = (\mathbb{I} + \delta\mathbb{C}_H : \mathbb{P}_H^{ell})^{-1} \quad (4.34)$$

l'équation (4.33) s'écrit finalement :

$$d\mathbb{C}_H = \frac{df_R}{2\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} \mathbb{B} : d\mathbb{C}_R : \mathbb{A} d\phi \quad \text{avec } \mathbb{B} = (\mathbb{I} + \delta\mathbb{C}_H : \mathbb{P}_H^{ell})^{-1} \quad (4.35)$$

dont on déduit les deux termes recherchés :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial K_{tR}}(\mathbb{C}_{\mathbb{H}}) &= \frac{df_R}{2\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} \mathbb{B} : \frac{\partial \mathbb{C}_R}{\partial K_{tR}} : \mathbb{A} d\phi \\ \frac{\partial}{\partial K_{nR}}(\mathbb{C}_{\mathbb{H}}) &= \frac{df_R}{2\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} \mathbb{B} : \frac{\partial \mathbb{C}_R}{\partial K_{nR}} : \mathbb{A} d\phi \end{aligned} \quad (4.36)$$

On obtient ainsi des expressions analytiques des termes tensoriels recherchés. Il reste donc à comparer les résultats obtenus par les trois méthodes pour ces termes.

4.5 Comparaison des méthodes - Détermination des critères homogénéisés

Dans cette section nous comparons à différents niveaux les méthodes de calcul développées dans la section précédente. Tout d'abord, nous évaluons les méthodes de détermination des termes tensoriels recherchés $\partial\mathbb{C}_H/\partial K_{tR}$ et $\partial\mathbb{C}_H/\partial K_{nR}$. Ensuite nous déterminons

les critères homogénéisés du matériau granulaire sur la base des premiers résultats des trois méthodes. Nous comparons donc les domaines des critères homogénéisés obtenus par les trois méthodes et ceux en adoptant un des critères locaux pour l'interface (section 4.2). Une quatrième méthode de calcul numérique développée hors du présent travail nous permet de trancher quant à l'exactitude des prédictions des méthodes. Cette méthode se base sur le même raisonnement que la méthode semi-numérique. Elle utilise des outils numériques plus précis, surtout pour les calculs des tenseurs de Hill (une intégration numérique sur des points de Gauss pour estimer ces tenseurs).

4.5.1 Comparaison sur les termes recherchés

Les premiers résultats obtenus par les trois méthodes pouvant être comparés concernent les deux dérivées tensorielles recherchées. Ces termes tensoriels étant isotropes transverses nous comparons les résultats des quatre méthodes pour chacune des cinq composantes indépendantes des deux termes. Les méthodes de calcul ont été couplées à la méthode d'inclusion équivalente en contrainte uniforme développée au chapitre précédent. Ainsi chaque composante est tracée selon l'angle θ_R , orientation de la famille d'inclusion perturbée, et ce avec les trois méthodes. On admet que la quatrième méthode (entièrement numérique) développée hors du présent travail donne les résultats les plus précis. Elle servira de référence pour la comparaison et la validation des autres méthodes. Nous commençons par les composantes du terme $\partial\mathbb{C}_H/\partial K_{tR}$. Notons que la précision des méthodes dans la prédiction de ces composantes conditionne leurs précision dans la détermination de $\overline{T_t^2}$. En effet, en vue des équations (4.9 et 4.1), $\overline{T_t^2}$ ne peut s'écrire que comme une combinaison linéaire des cinq composantes isotropes transverses de $\partial\mathbb{C}_H/\partial K_{tR}$. Cette combinaison linéaire dépend de la forme du chargement. Les figures (4.6a) à (4.6e) retracent les courbes de ces composantes en fonction de θ_R telles qu'elles sont prédites par les quatre méthodes. On peut déjà remarquer à partir de ces figures, que la méthode semi-numérique basée sur la différentiation du schéma auto-cohérent (en rose) présente des résultats très satisfaisants, s'approchant le plus de la méthode numérique exacte (en bleu). En effet, l'erreur relative moyenne n'est que de 5%. Cependant ce n'est pas le cas

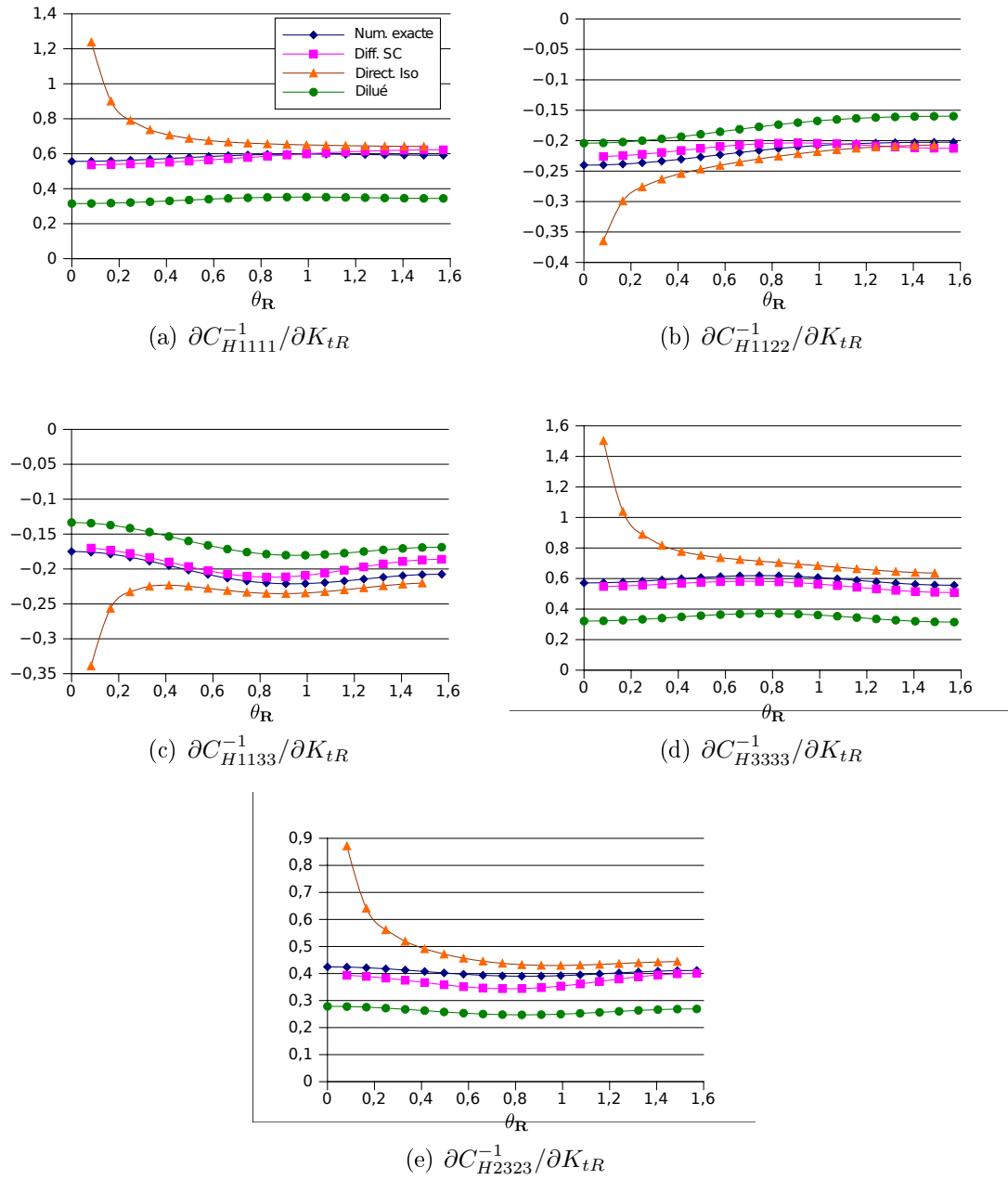


FIGURE 4.6 – Composantes du tenseur $\partial \mathbb{C}_H^{-1}/\partial K_{tR}$ en fonction de θ_R orientation de la famille perturbée (normalisées par la fraction de la famille) telles que prédites par les méthodes de calcul

pour les deux autres méthodes qui sont moins précises. La méthode par calcul direct avec « isotropisation » ainsi que la méthode basée sur le schéma dilué donnent des erreurs

relatives moyennes de presque 30%. On peut tout de même noter que la méthode de calcul direct donne de bons résultats à partir du sixième pas de θ_R (correspondant à $\theta_R = 6\pi/19$). Si l'on écarte les cinq premières valeurs prédites, l'erreur relative moyenne de cette méthode (par rapport à la méthode numérique exacte) tombe à 16%. On peut expliquer ce résultat par le fait que l'influence des tenseurs de Hill sur les composantes isotropes transverses doit être assez importante pour les familles à θ_R faible (proche de la direction d'isotropie transverse de \mathbb{C}_H). La simplification faite en section 4.4.2 consistant à « isotropiser » les tenseurs de Hill induit alors une erreur importante pour les faibles valeurs de θ_R . Pour la méthode basée sur le schéma dilué on peut également noter que l'allure de la courbe des composantes en fonction de θ_R est la même que celle de la méthode exacte. Un écart quasi-constant par composante est observable. Ceci indique que cette méthode pourrait à priori être calée pour donner des résultats plus précis.

On s'intéresse maintenant aux composantes du deuxième terme tensoriel $\partial\mathbb{C}_H/\partial K_{nR}$. La moyenne quadratique de la composante normale du vecteur contrainte $\overline{T_n^2}$ s'écrit comme combinaison linéaire des composantes de ce terme. La figure 4.7 compare les prédictions de la méthode semi-numérique, de la méthode analytique basée sur le schéma dilué et de la méthode numérique précise pour ces composantes. La méthode de calcul direct a été écartée. Les mêmes constatations que pour le premier terme peuvent être faites concernant les trois méthodes. En revanche, L'écart entre la méthode semi-numérique et la méthode numérique exacte est plus prononcé que pour le calcul de la première dérivée. Cet écart est principalement aux erreurs numérique intervenant dans l'algorithme de la méthode semi-numérique.

4.5.2 Critères homogénéisés

Dans ce qui suit nous déterminons les critères homogénéisés du matériau granulaire pour les critères locaux considérés dans les interfaces et reportés dans le tableau 4.1. Les résultats de calcul des composantes des dérivées par les quatre méthodes sont différents, les critères homogénéisés devraient l'être également. Le but est de remonter aux domaines

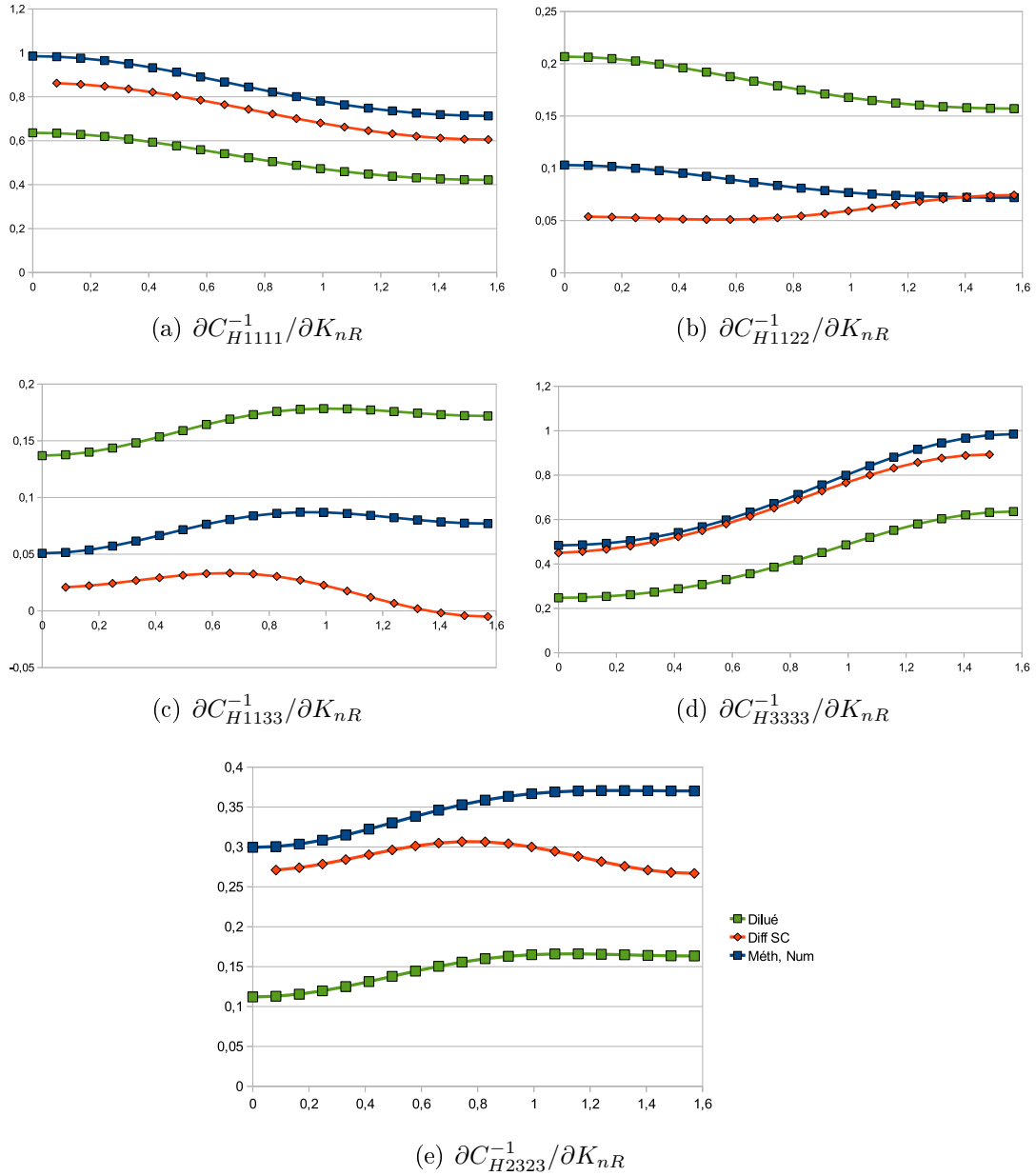


FIGURE 4.7 – Composantes du tenseur $\partial C_H^{-1}/\partial K_{nR}$ en fonction de θ_R orientation de la famille perturbée (normalisées par la fraction de la famille) telles que prédites par les méthodes de calcul

des critères homogénéisés à partir de ces premiers résultats et de comparer les domaines prédits par les différentes méthodes pour un critère donné.

Critère local de Von Mises

Pour un critère de type Von Mises dans les interfaces (tableau 4.1). La rupture se produit localement par glissement inter-granulaire uniquement. L'expression du critère local ne porte que sur la moyenne quadratique de la composante tangentielle du vecteur contrainte. Cette composante ne met en jeu que le premier terme tensoriel évalué $\partial\mathbb{C}_H/\partial K_{tR}$. Une fois ce terme calculé par l'une des méthodes, l'équation (4.9) permet de relier la contrainte macroscopique appliquée au V.E.R à la moyenne de la composante tangentielle du vecteur contrainte dans une famille d'inclusion donnée. La famille pour laquelle cette composante est maximale est la famille d'inclusion qui casse en premier. Lorsque cette valeur maximale atteint T_{cr} (valeur critique du critère) sous un chargement croissant, on considère que le chargement imposé est alors sur la frontière du critère homogénéisé. Le critère macroscopique est donc de la forme (4.38). Pour déterminer toute la frontière du critère, on doit explorer des trajets de charge différents. La forme suivante du tenseur de contrainte macroscopique nous permet d'explorer tous les trajets de charge axisymétriques (autour de \underline{e}_3) possibles :

$$\Sigma = \begin{pmatrix} R \cos \Theta & 0 & 0 \\ 0 & R \cos \Theta & 0 \\ 0 & 0 & R \sin \Theta \end{pmatrix} \quad \text{dans la base } (\underline{e}_1, \underline{e}_2, \underline{e}_3) \quad (4.37)$$

$$\frac{2|\Omega|}{N_R|\partial G^s|} \sup \left(\Sigma : \frac{\partial \mathbb{C}_H}{\partial K_{tR}} : \mathbb{C}_H^{-1} \right) \leq T_{cr} \quad (4.38)$$

La frontière du critère peut soit être tracée dans le plan $(\Sigma_{11}, \Sigma_{33})$ (voir fig.4.8) ou dans le plan de la contrainte moyenne et de la contrainte déviatorique (Σ_m, Σ_d) (voir fig.4.9) où Σ_m et Σ_d sont données par :

$$\begin{aligned} \Sigma_m &= \frac{1}{3} \text{trace}(\Sigma) \\ \Sigma_d &= \frac{1}{2} \sqrt{\Sigma_d : \Sigma_d} \end{aligned} \quad (4.39)$$

avec

$$\Sigma_d = \Sigma - \Sigma_m \mathbf{1}$$

On peut noter que la méthode issue de la différentiation du schéma auto-cohérent, la méthode numérique exacte ainsi que celle par calcul direct conduisent à des domaines du critère homogénéisé très proches. En revanche, la méthode analytique basée sur le schéma dilué donne un domaine beaucoup plus grand qui englobe les autres domaines. La frontière du critère homogénéisé est sensiblement elliptique mis à part pour le calcul dilué. Les courbes doublées de la frontière du critère dans le plan (Σ_m, Σ_d) (fig.4.8.b) portent à croire que le critère pourrait dépendre du troisième invariant de la contrainte macroscopique. Cette hypothèse sera explorée en détail dans la section 4.6 avec le critère elliptique.

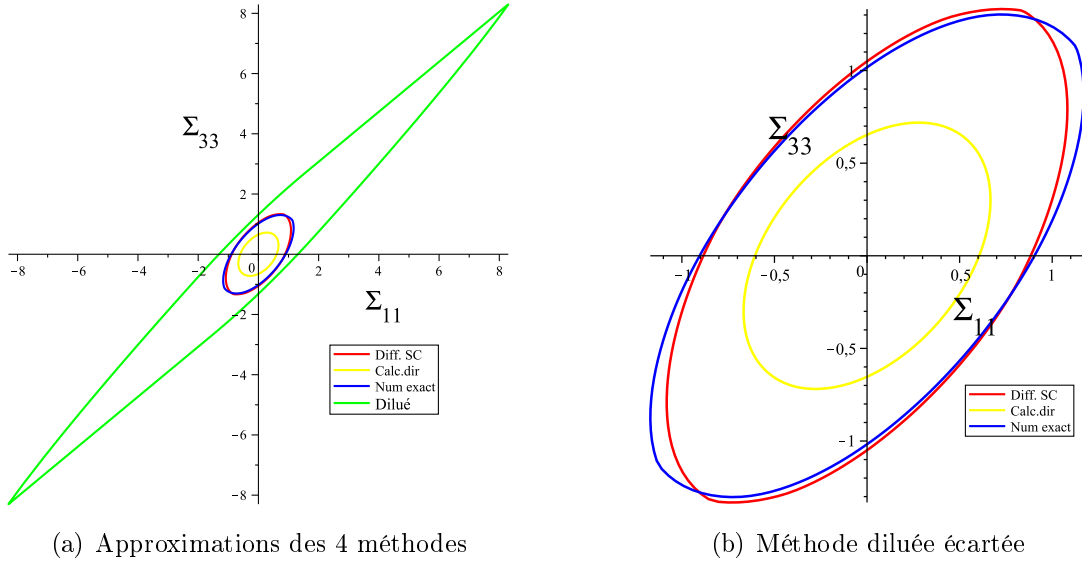


FIGURE 4.8 – Frontière du critère homogénéisé dans le plan $(\Sigma_{11}, \Sigma_{33})$ dû à un critère local de Von Mises dans les interfaces

Critère local elliptique

Ce critère s'exprime en fonction des moyennes quadratiques des deux composantes du vecteur contrainte dans les interfaces $\sqrt{T_t^2}$ et $\sqrt{T_n^2}$ (deuxième ligne du tableau 4.1). Le critère homogénéisé dépend donc des résultats des quatre méthodes pour les termes tensoriels $\partial\mathcal{C}_H/\partial K_{tR}$ et $\partial\mathcal{C}_H/\partial K_{nR}$. La frontière de ce critère homogénéisé est également représentée dans les plans $(\Sigma_{11}, \Sigma_{33})$ et (Σ_m, Σ_d) (voir figure 4.10). Pour ce critère, la

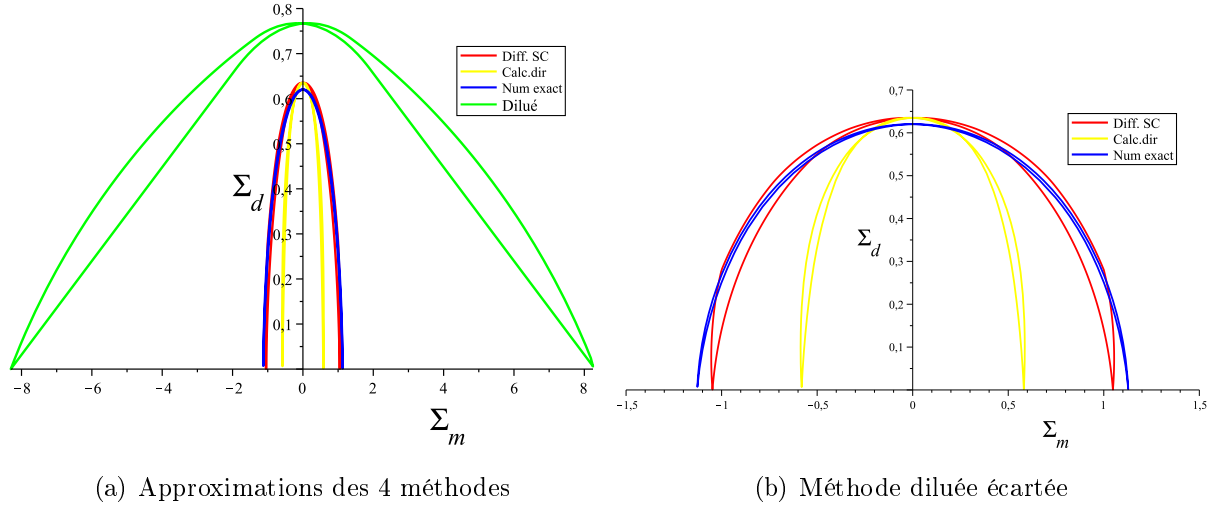


FIGURE 4.9 – Frontière du critère homogénéisé dans le plan (Σ_m, Σ_d) dû à un critère local de Von Mises dans les interfaces

méthode par calcul direct avec « isotropisation » a été écartée. On peut observer que les prédictions de la méthode basée sur le schéma dilué se sont nettement améliorées. En effet l'écart par rapport aux autres méthodes est beaucoup plus faible que pour le critère de Von Mises. Les prédictions de la méthode de différentiation du schéma auto-cohérent se sont également améliorées. Elles sont maintenant pratiquement confondues avec celles de la méthode numérique précise. L'amélioration des résultats de ces deux méthodes est vraisemblablement due au fait que les erreurs sur la prédiction de $\sqrt{T_t^2}$ et $\sqrt{T_n^2}$ se neutralisent dans l'équation du critère local elliptique ??.

Critère local rectangulaire

Ce critère dépend également des moyennes quadratiques des deux composantes du vecteur contrainte dans les interfaces $\sqrt{T_t^2}$ et $\sqrt{T_t^2}$ mais de manière indépendante. Les figures 4.11 et 4.12 présentent les résultats obtenus pour la frontière du critère par les différentes méthodes de calcul dans les plans $(\Sigma_{11}, \Sigma_{33})$ et (Σ_m, Σ_d) . On y observe deux domaines pour chaque méthode : l'un est dû à l'équation du critère local portant sur $\sqrt{T_n^2}$ et l'autre est dû à celle portant sur $\sqrt{T_t^2}$. Le domaine du critère homogénéisé est l'intersection de ces deux domaines (reportée en fig.4.13). La méthode du schéma dilué semble

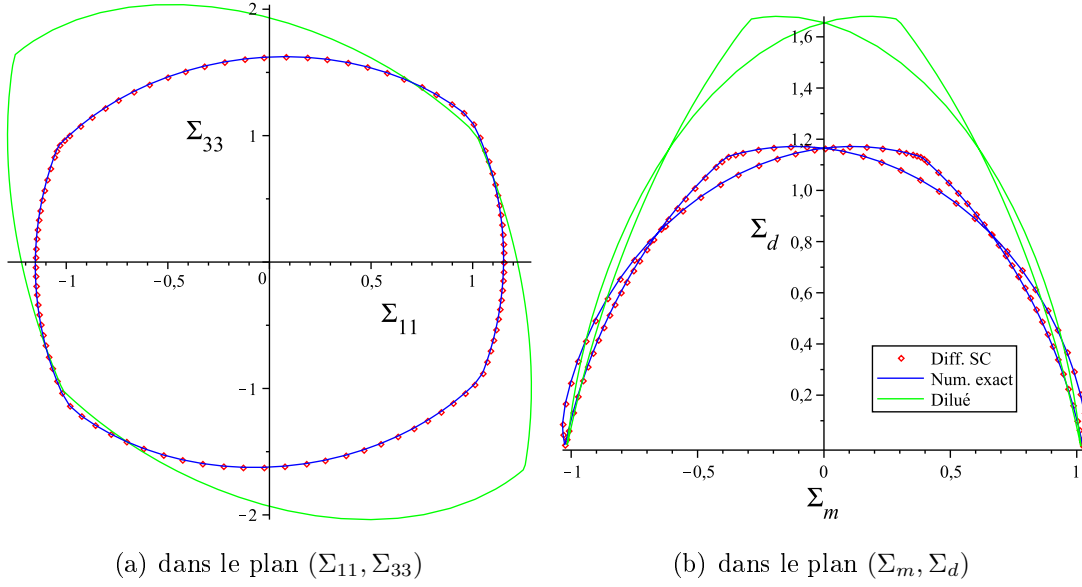


FIGURE 4.10 – Frontière du critère homogénéisé dû à un critère local elliptique dans les interfaces

donner des résultats satisfaisants contrairement au premier critère. En effet, l'intersection du domaine découlant de l'équation du critère local portant sur $\sqrt{T_n^2}$ avec celui de $\sqrt{T_t^2}$ permet de réduire l'erreur commise sur l'estimation de cette deuxième composante par la méthode diluée. Cette même erreur a conduit à une mauvaise approximation du premier critère global (fig.4.11). Les deux autres méthodes sont parfaitement confondues. On constate, à partir des figures des critères globaux dans le plan (Σ_m, Σ_d) , que le phénomène de dépendance du troisième invariant de la contrainte macroscopique se manifeste dans chacun des trois critères et pour les quatre méthodes de calcul.

4.6 Critère 3D et dépendance du troisième invariant : une ébauche

Dans cette section, nous explorons la dépendance du troisième invariant de la contrainte macroscopique, constatée dans les trois critères étudiés. Nous nous limiterons à un seul critère dans cette étude, celui dû à un critère elliptique dans les interfaces. Nous adaptons la méthode analytique basée sur le schéma dilué pour analyser d'autres

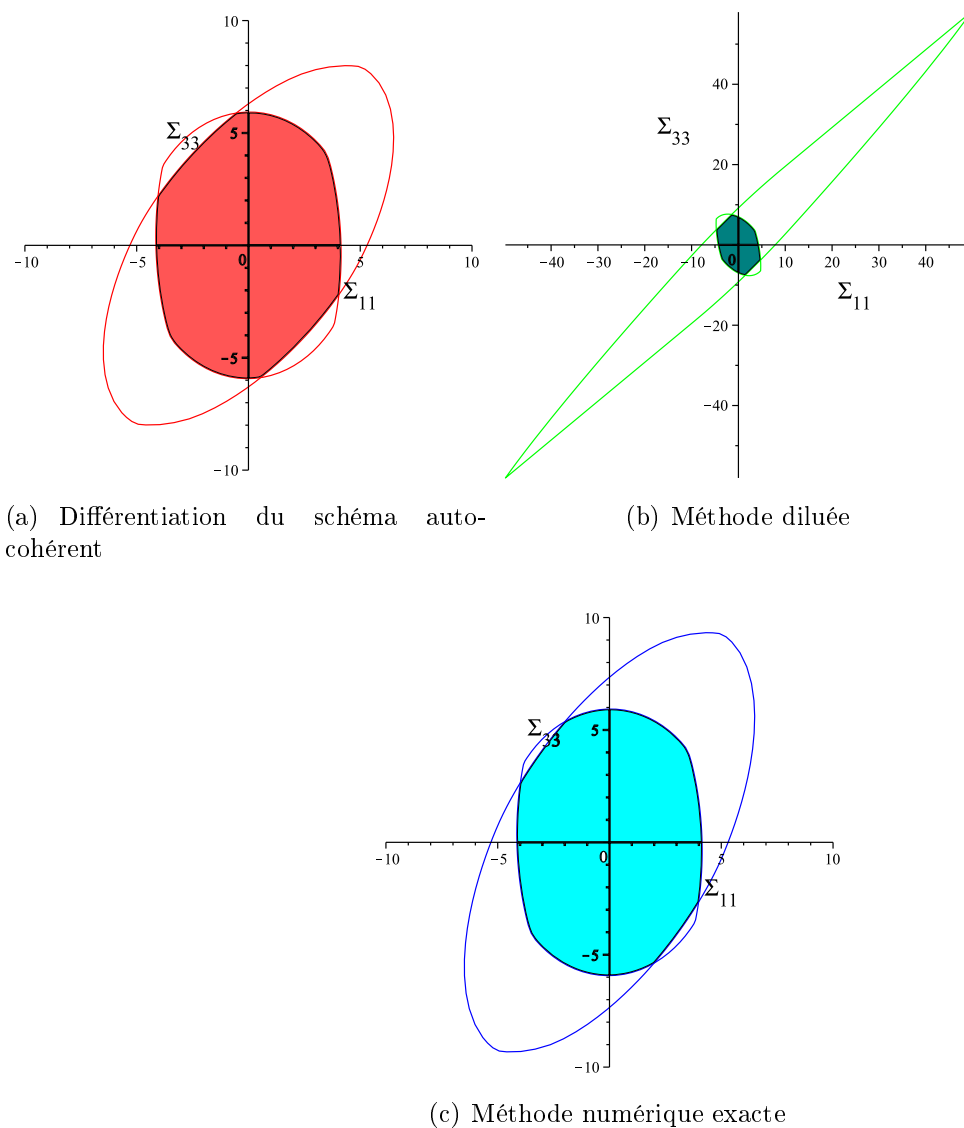


FIGURE 4.11 – Frontière du critère homogénéisé dans le plan $(\Sigma_{11}, \Sigma_{33})$ dû à un critère local rectangulaire dans les interfaces

trajets de charges que les trajets axisymétriques. En effet, celle-ci est la plus facile à généraliser et celle requiert des temps de calculs les plus faibles. Ainsi, pour la généraliser, on admet que des inclusions de même colatitude (θ_r) peuvent avoir des états de contrainte différents (dans les interfaces). Les inclusions avec un même état de contrainte sont donc disposées en familles I_r plus petites que celles vues jusque là (repérées par un θ_r et un

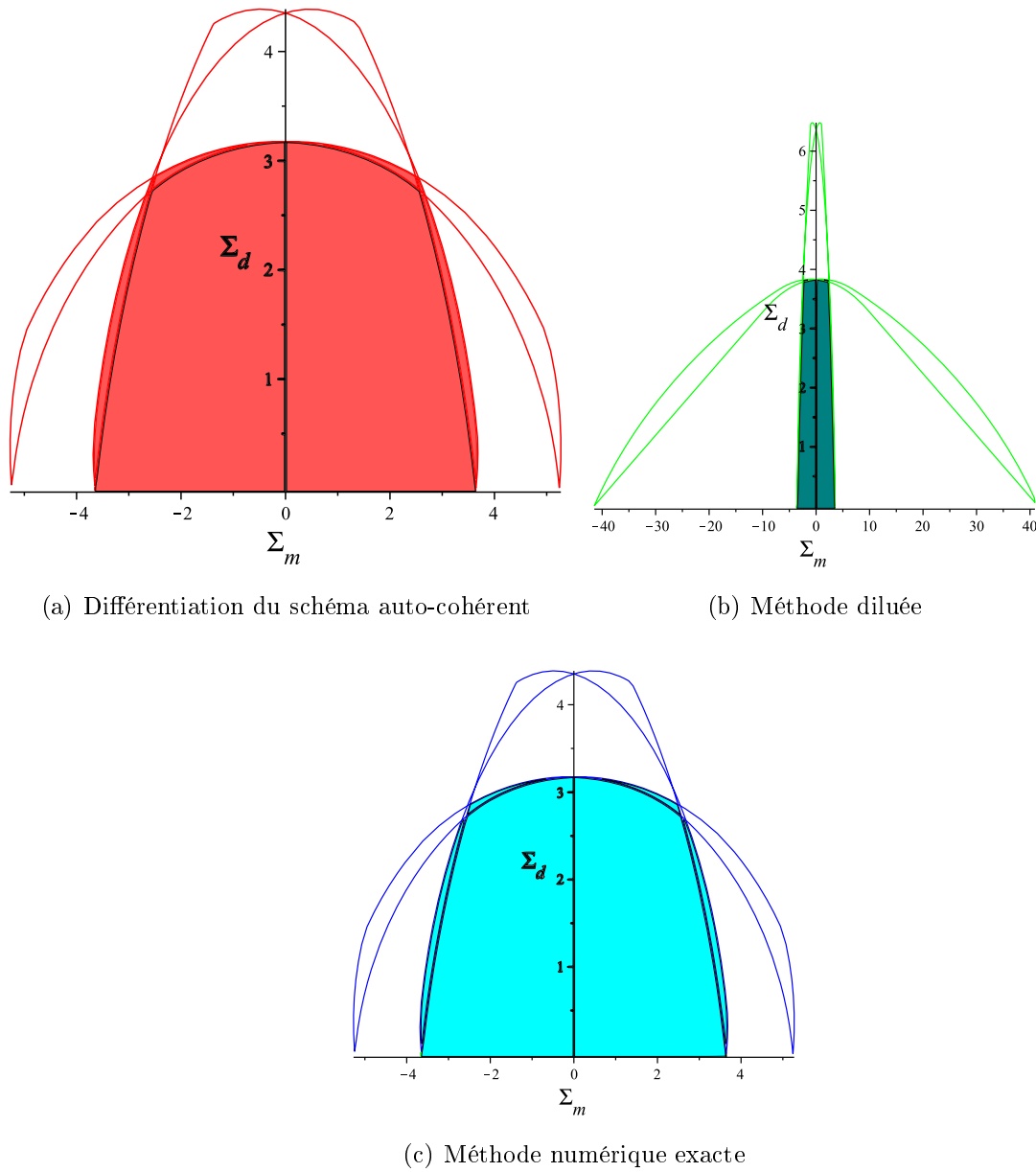


FIGURE 4.12 – Critère homogénéisé dans le plan (Σ_m, Σ_d) dû à un critère local rectangulaire dans les interfaces

ϕ_r). Nous considérons pour cette étude, un chargement en contrainte dont les directions principales sont celles de la base d'étude pour explorer un chargement quelconque (en effet la base d'étude peut être choisie de manière à correspondre aux directions principales

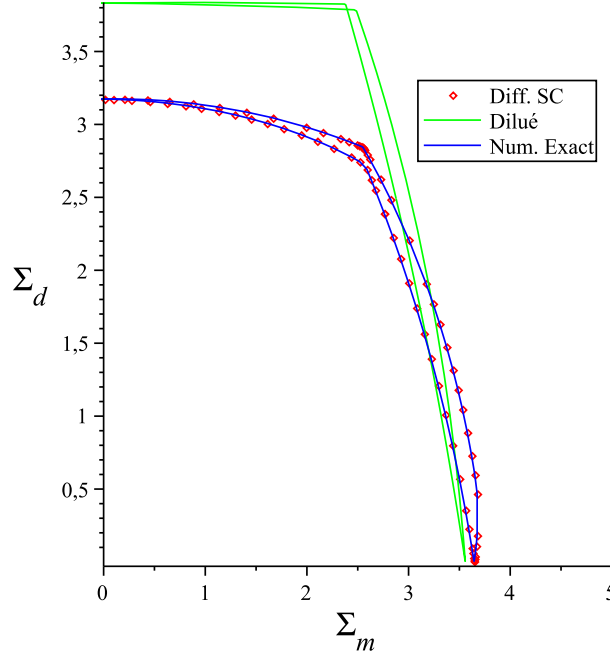


FIGURE 4.13 – Critère homogénéisé dans le plan (Σ_m, Σ_d) dû à un critère local rectangulaire en \overline{T}_n^2 et \overline{T}_t^2 dans les interfaces - Intersection pour les trois méthodes

d'un tenseur quelconque) :

$$\Sigma = \Sigma_1 \underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1 + \Sigma_2 \underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2 + \Sigma_3 \underline{e}_3 \otimes \underline{e}_3 \quad (4.40)$$

Les composantes selon $\underline{e}_1 \otimes \underline{e}_1$ et $\underline{e}_2 \otimes \underline{e}_2$ sont donc maintenant indépendantes.

Le même raisonnement que dans la description de la méthode en section 4.4.3 est repris pour relier état de contrainte local à état de contrainte macroscopique. Le triplet $(\Sigma_1^*, \Sigma_2^*, \Sigma_3^*)$ désigne un point sur la frontière du critère ∂G_{hom} (dans l'espace $(\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3)$), s'il correspond à l'atteinte du critère local dans l'interface d'une inclusion donnée (orientée de (θ_r, ϕ_r)). Pour chercher l'ensemble de ces points, il suffit d'explorer tous les trajets de charge possibles en faisant varier les rapports $r_1 = \Sigma_1/\Sigma_3$ et $r_2 = \Sigma_2/\Sigma_3$. Pour un couple (r_1, r_2) représentant un trajet de charge donné, l'augmentation du chargement (commandé par l'augmentation de Σ_3) permet d'obtenir un seul point de la frontière du critère.

Une alternative plus pratique consiste à prendre une forme particulière de $\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3$ de

manière à parcourir tout les rapports r_1 et r_2 possibles :

$$\begin{aligned}\Sigma_1 &= R \sin(\Theta_1) \cos(\Phi_1) \\ \Sigma_2 &= R \sin(\Theta_1) \sin(\Phi_1) \\ \Sigma_3 &= R \cos(\Theta_1)\end{aligned}\tag{4.41}$$

De cette manière en faisant varier Θ_1 entre 0 et π et Φ_1 entre 0 et 2π les rapports r_1 et r_2 varient entre 0 et $+\infty$. Nous traçons donc le critère de manière discrète pour des Θ_1 et Φ_1 dans ces intervalles. Le critère obtenu dans l'espace $(\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3)$ est reporté en (fig.4.14). Il peut également être représenté dans l'espace des invariants $(I_1, \sqrt{J_2}, \sqrt{J_3})$. Sur cette figure, la trisectrice est également tracée (en noir) pour observer la symétrie

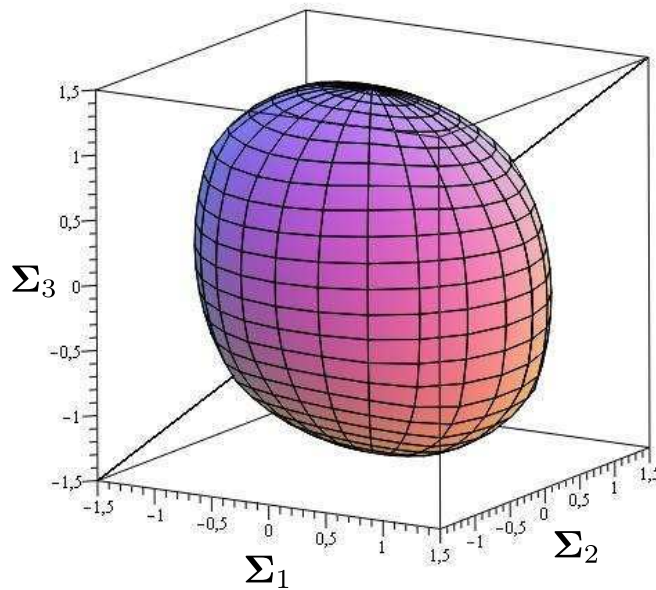


FIGURE 4.14 – Critère homogénéisé ∂G_{hom} (en 3D dans l'espace des contraintes principales) obtenue par la méthode analytique basée sur le schéma dilué ($\alpha = 0.02$, $\beta = 0.05$)

de révolution du critère autour de celle-ci. Une telle symétrie traduirait une indépendance du critère vis-à-vis du troisième invariant $\sqrt{J_3}$. Le critère ne semble pas présenter

cette symétrie autour de la trisectrice. Pour mieux l'examiner il suffit de l'étudier en fonction de l'angle de Lode (angle autour de la trisectrice). Des coupes transversales par des plans perpendiculaires à la trisectrice peuvent nous aider à décrire le critère en fonction de l'angle de Lode. Pour cela les coordonnées de Haigh-Westergaard sont utilisées (ξ, ρ, Θ) [Haigh, 1920, Westergaard, 1920]. Celles-ci sont équivalentes aux coordonnées cylindriques et ont pour axe la trisectrice. Elles s'expriment en fonction des trois invariants de la contrainte macroscopique $(I_1, J_2$ et $J_3)$ comme suit :

$$\begin{aligned}\xi &= \frac{1}{\sqrt{3}} I_1 \\ \rho &= \sqrt{2J_2}\end{aligned}\tag{4.42}$$

$$\cos(3\Theta) = \frac{27}{4} \frac{J_3}{J_2 \sqrt{2J_2}}$$

Θ représente ici l'angle de Lode [Lode, 1926], angle autour de la trisectrice ayant pour origine la projection sur le plan déviateur de l'axe de la contrainte principale Σ_1 . Le chargement macroscopique, en contraintes principales $\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3$ utilisé plus haut, peut alors s'exprimer en fonction des coordonnées de Haigh-Westergaard :

$$\begin{pmatrix} \Sigma_1 \\ \Sigma_2 \\ \Sigma_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \xi \\ \xi \\ \xi \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{2}{3}} \rho \begin{pmatrix} \cos(\Theta) \\ \cos(\Theta - 2\pi/3) \\ \cos(\Theta + 2\pi/3) \end{pmatrix}\tag{4.43}$$

A l'aide de cette paramétrisation, il est possible de tracer des coupes transversales (perpendiculaires à la trisectrice) du critère 3D représenté plus haut. En effet, il suffit de prendre un ξ donné, de balayer les Θ possibles (entre 0 et π) et de déterminer la valeur de ρ qui correspond à la limite du critère, celle pour laquelle la famille d'inclusion la plus sollicitée atteint son critère. Cette valeur de ρ pour un ξ et un Θ donnés est déterminée par dichotomie, en partant de deux valeurs maximale et minimale et en vérifiant à chaque fois si le critère est atteint pour une des familles. Ces coupes transversales sont présentées en figure (4.15)). Elles permettent d'observer l'effet de l'angle de Lode et donc du

troisième invariant le long de la trisectrice. Cet effet parait négligeable pour les valeurs de ξ proches de zéro et semble s'accroître pour les valeurs élevées $|\xi|$.

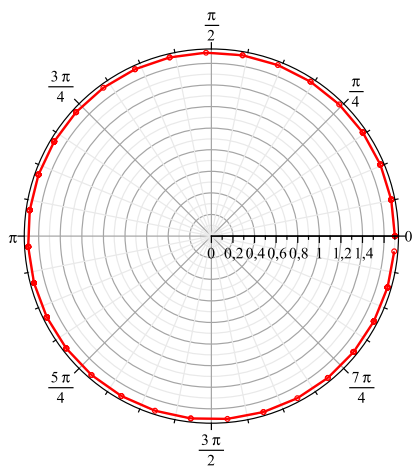
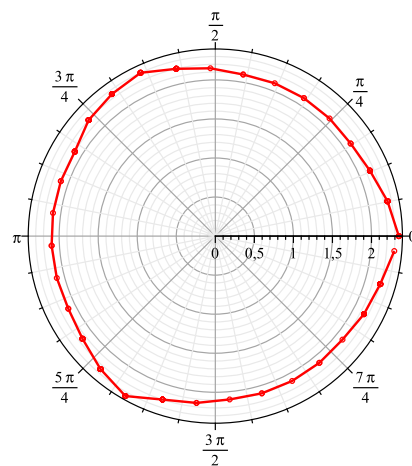
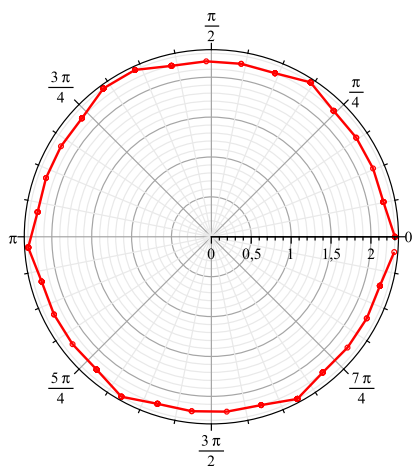
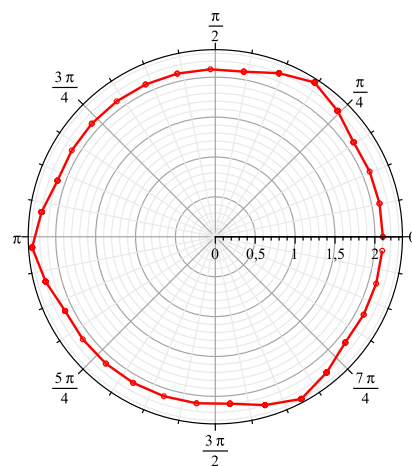
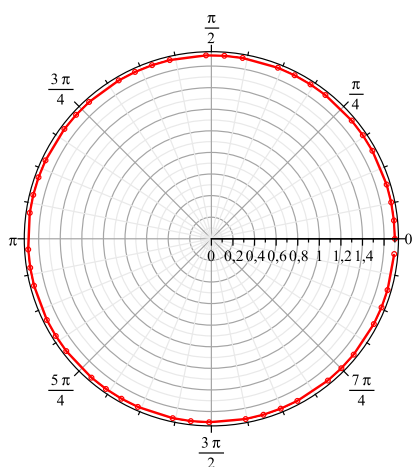
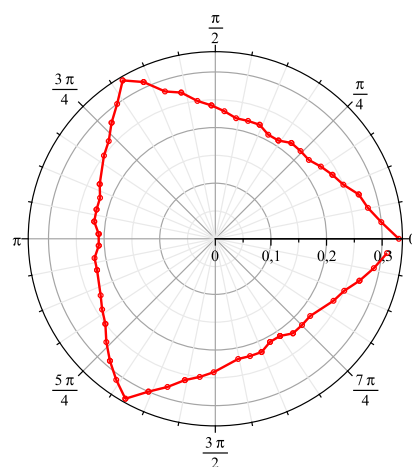
(a) $\xi = -1$ (b) $\xi = -0.5$ (c) $\xi = 0$ (d) $\xi = 0.5$ (e) $\xi = 1$ (f) $\xi = 1.7$

FIGURE 4.15 – Coupes du critère 3D perpendiculairement à la trisectrice- dépendance de l'angle de Lode (ρ en fonction de Θ à ξ fixé)

4.7 Conclusion

Dans ce chapitre nous nous sommes intéressés à la rupture fragile d'un matériau granulaire à inclusions élançées causée par une rupture locale dans les interfaces (mode de rupture que nous supposons se produire pour le gel de C-S-H). Nous avons tout d'abord choisi plusieurs critères de rupture locaux pour les interfaces, portant sur les moyennes quadratiques des composantes du vecteur contrainte dans les interfaces :

- Un critère de Von Mises bornant la composante tangentielle ;
- Un critère elliptique portant sur les deux composantes ;
- Un critère bornant la composante tangentielle et la composante normale indépendamment.

Ensuite, en adaptant une méthode de changement d'échelle [Maalej et al., 2009] au cas d'inclusions ellipsoïdales, nous avons pu relier les moyennes des composantes du vecteur contrainte, dans une famille d'inclusion d'orientation (colatitude) donnée, au chargement macroscopique appliqué au V.E.R (considéré axisymétrique). Cette méthode a fait apparaître deux termes tensoriels représentant la variation de la rigidité homogénéisée (rigidité calculée dans le chapitre 3) par rapport aux modules d'interfaces d'une famille d'inclusion donnée. Le calcul de ces termes s'est fait au moyen de quatre méthodes de calcul différentes :

- Une méthode semi-numérique issue de la différentiation du schéma auto-cohérent rencontré en chapitre 3 equation (3.55)
- Une méthode de calcul direct avec isotropisation des tenseurs de Hill,
- Une méthode analytique basée sur le schéma dilué généralisé,
- Une méthode numérique donnant des résultats précis servant de référence et dont le développement n'a pas été fait dans le cadre du travail présent.

Ces quatre méthodes ont été confrontées dans la détermination des termes tensoriels recherchés. Puis elles ont été utilisées pour remonter aux critères homogénéisés pour chaque critère local considéré dans les interfaces. Les différentes méthodes ont alors pu être comparées dans la détermination des critères homogénéisés également. Au passage, nous avons

remarqué que les critères homogénéisés présentaient une dépendance du troisième invariant de la contrainte macroscopique (ou de l'angle de Lode). Cette dépendance a été examinée à l'aide d'une version généralisée de la méthode analytique basée sur le schéma dilué. Cette méthode a permis d'analyser des états de contrainte différents des familles d'inclusion repérées par leurs colatitudes et leurs longitudes et donc d'explorer des chargements macroscopiques autres qu'axisymétriques. Ceci a conduit à la détermination du critère homogénéisé en 3D et nous a permis à l'aide de projections et de coupes transversales du critère 3D d'observer et de décrire la dépendance vis à vis de l'angle de Lode.

* *

*

Chapitre 5

Modèles de rupture de la pâte de ciment - Validation par données expérimentales

Résumé : *Dans ce chapitre, nous proposons des modèles micromécaniques pour le comportement à la rupture des pâtes de ciment. Ces modèles intègrent le modèle de rupture, développé dans le chapitre précédent, pour le gel de C-S-H (hydrate principal de la pâte) en utilisant la méthode semi-numérique. La rupture fragile du gel de C-S-H engendre ainsi une rupture fragile ou ductile de la pâte que nous nous proposons de caractériser. Nous nous penchons ensuite sur l'étude de la validité des différents modèles proposés dans la première partie de ce chapitre à l'aide de données expérimentales de résistance à la compression des pâtes de ciment.*

Sommaire

5.1	Introduction	125
5.2	Microstructure et évolution des propriétés mécaniques de la pâte de ciment	126
5.3	Modélisation micromécanique de la pâte de ciment	128
5.3.1	Modèle de Mori-Tanaka en rupture fragile	129
5.3.2	Modèle auto-cohérent en rupture fragile	132
5.3.3	Modèle de Mori-Tanaka en rupture ductile	134
5.4	Données expérimentales sur les pâtes de ciment	137
5.5	Validation et calage des modèles de ruptures de la pâtes par données expérimentales	139
5.5.1	Paramètres de calage	140

5.5.2	Calage des modèles dans le cas d'une porosité séparée	141
5.5.3	Calage des modèles dans le cas où la porosité totale est placée dans le gel	145
5.6	Conclusion	163

5.1 Introduction

Le comportement en rupture de la pâte de ciment intéresse autant les industriels que les chercheurs depuis déjà quelques décennies. Une des caractéristiques majeures de ce comportement, notamment aux yeux des industriels, est la résistance à la compression uniaxiale de la pâte. A ce sujet, plusieurs modèles permettant de prédire cette résistance ont été développés et publiés : des modèles empiriques [Bolomey, 1935, Abrams, 1919], phénoménologiques [Féret, 1892, de Larrard, 1999] ou micromécaniques [Sanahuja, 2008, Pichler et al., 2013, Termkhajornkit et al., 2014]. L'avantage du dernier type par rapport aux autres est qu'il ne permet pas seulement d'obtenir la résistance à la compression mais aussi de décrire l'évolution de la rupture dans la pâte (post-pic, endommagement...), de détecter les mécanismes qui l'engendrent et de déterminer le critère de rupture en entier (résistances à d'autres types de chargements). Les modèles micromécaniques les plus simples, développés pour la pâte de ciment, ne s'intéressent pas à la microstructure du gel de C-S-H [Bernard et al., 2003], hydrate principal de la pâte de ciment dans laquelle il représente une fraction volumique importante. Dans ces travaux, la modélisation microstructurale s'arrête au niveau des constituants de la pâte et le gel de C-S-H est considéré comme une phase homogène. Des modèles plus complexes, ont été proposés par d'autres auteurs [Sanahuja, 2008, Pichler et al., 2013, Termkhajornkit et al., 2014] permettant de modéliser de manière simplifiée le comportement à la rupture des gels de C-S-H et de remonter ensuite à celui de la pâte de ciment. Ces modèles ont donné des meilleures prédictions de résistances et ont fourni des explications précises sur les phénomènes et les mécanismes vraisemblablement mis en jeu lors de la rupture de la pâte et même en phase post-rupture. Cependant, dans ces travaux [Pichler et al., 2013, Termkhajornkit et al., 2014, Sanahuja, 2008], les auteurs avancent des hypothèses simplificatrices, lors de la modélisation du gel de C-S-H, qui peuvent limiter l'application de leurs modèles à un mode de rupture local particulier et peuvent donner lieu à de mauvaises prédictions de la résistance. Ces hypothèses portent principalement sur la forme (en aiguilles [Pichler et al., 2013, Termkhajornkit et al., 2014] ou

aplatie [Sanahuja, 2008]) et les propriétés (isotropes) des particules de C-S-H modélisées ainsi que sur le mode de rupture locale admis (intra-granulaire). Ces limitations nous ont incités à développer de nouveaux modèles de rupture pour la pâte permettant d'explorer des modes de ruptures locaux inter-granulaires dans les gels de C-S-H. La forme générale des particules modélisées (en ellipsoïdes) et la prise en compte des effets d'interface sur leurs propriétés élastiques (et leur isotropie) confèrent à ce nouveau modèle un meilleur champ d'application. Dans cette vision, nous proposons, dans ce chapitre, plusieurs modèles de rupture (fragiles et ductiles) de la pâte qui intègrent le modèle du gel de C-S-H développé dans le cadre du chapitre 5.6. Des données variées de pâtes nous permettent ensuite de caler ces modèles et d'évaluer leur aptitude prédictive.

5.2 Microstructure et évolution des propriétés mécaniques de la pâte de ciment

Dans la littérature, les auteurs s'intéressant aux aspects micromécaniques de la pâte de ciment durcie, ne lui attribuent pas tous la même morphologie. Certains la modélisent comme un composite à matrice, d'autres comme matériau granulaire ou polycristal. En revanche, la majorité s'accorde sur la présence des différentes phases solides, produits ou résidus de la réaction d'hydratation du ciment, dont les plus courantes sont :

- L'alite notée C3S et de formule chimique $(\text{CaO})_3(\text{SiO}_2)$
- La bélite notée C2S et de formule chimique $(\text{CaO})_2(\text{SiO}_2)$. L'Alite et la Bélite représentent le clinker anhydre non consommé par la réaction qui se retrouve sous forme d'inclusions dans la pâte durcie
- La chaux libre (free lime) : CaO , la teneur doit être en général inférieure à 2 % en masse dans le clinker
- La Portlandite : hydroxyde de calcium noté CH et de formule chimique $\text{Ca}(\text{OH})_2$, provenant de l'hydratation de la chaux libre.
- L'aluminate ou célite notée C3A et de formule chimique $(\text{CaO})_3(\text{Al}_2\text{O}_3)$
- La calcite de formule chimique CaCO_3

- Les C-S-H silicates de calcium hydratés
- Le gypse : $\text{CaSO}_4 \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$
- L'ettringite (Aluminate ferrite trisubstituée) notée Aft
- Le monosulfoaluminate de calcium hydraté (phase aluminat ferrite monosubstituée) notée Afm
- Les semi-hydrates notés SH présents lors de la formulation et consommés par la réaction

Ces phases sont présentes dans les pâtes de ciment durcies sous une disposition inclusionnaire particulière et dans des tailles caractéristiques d'inclusions. Le tableau suivant résume cette disposition inclusionnaire et cette taille caractéristique ainsi que les propriétés élastiques associées aux différentes phases retrouvées dans la pâte durcie. Selon la formu-

TABLEAU 5.1 – phases présentes dans la pâte de ciment durcie : forme des inclusions, tailles et propriétés élastiques [Termkhajornkit et al., 2014, Sanahuja, 2008]

Phase	Forme	Taille caractéristique	E en GPa, (ν)
C-S-H solide	Prolate (ω à calibrer)	quelques nm	57.1 (0.27)
C_3S	Sphère	de l'ordre du μm	135 (0.3)
C_2S	Sphère	de l'ordre du μm	130 (0.3)
Ettringite	Aiguille	$0.5 \times 10 \mu m$	22.4 (0.25)
Monosulfoalluminate	Oblate ($\omega = 0.1$)	de l'ordre du μm	42.3 (0.324)
Gypse et semi-hydrate	Aiguille	de l'ordre du μm	33.9 (0.324)
Portlandite	Oblate ($\omega = 0.1$)	jusqu'à une douzaine de μm	42.3 (0.324)
Calcite	Sphère	quelques μm	76 (0.3)
Pores	Sphère	< 500 nm en majorité	0

lation, les phases décrites (ou une partie d'entre elles) sont retrouvées dans la pâte durcie avec des proportions différentes. L'évolution de ces proportions contrôle l'évolution de la résistance de la pâte. Ces proportions sont communément mesurées dans la littérature par le paramètre GSR (Gel-Space Ratio) [Pichler et al., 2013, Termkhajornkit et al., 2014],

noté γ , qui est calculé, à un avancement donné de la réaction d'hydratation, comme suit :

$$GSR = \gamma = \frac{f_{hyd}}{f_{hyd} + f_{p.cap}} \quad (5.1)$$

où f_{hyd} et $f_{p.cap}$ représentent respectivement la fraction totale d'hydrates et la porosité dans la pâte durcie. Ces fractions évoluent avec l'avancement de la réaction d'hydratation. D'ailleurs [Pichler et al., 2013] utilisent les lois d'évolution établies par Powers [Powers and Brownyard, 1946] pour relier le paramètre GSR à cet avancement ξ et au rapport eau sur ciment :

$$GSR = \frac{43.15\xi}{20\xi + 63(w/c)} \quad (5.2)$$

L'intérêt du paramètre GSR est qu'il permet d'approximer l'évolution de la résistance de la pâte par une loi empirique de la forme :

$$R_c = \beta\gamma^\alpha \quad (5.3)$$

Pichler et ses collaborateurs [Pichler et al., 2013] ont démontré que les paramètres d'une telle expression empirique restaient sensibles au rapport eau sur ciment initial, ce qui en rendait l'usage assez restreint.

Toujours dans le soucis de prédire l'évolution de la résistance de la pâte de ciment, nous développons dans ce qui suit des modèles micromécaniques dont le champ d'application est beaucoup plus large que les modèles empiriques. Le paramètre GSR sera utile pour comparer les résistances expérimentales aux résistances prédites.

5.3 Modélisation micromécanique de la pâte de ciment

Dans cette section, trois configurations microstructurales différentes sont considérées pour modéliser la pâte de ciment. Dans ces configurations on séparera entre l'échelle microscopique où le gel est un milieu granulaire, l'échelle mesoscopique (appelée échelle macroscopique dans le chapitre 5.6) où il est une phase homogénéisée cohabitant avec les autres hydrates et la porosité capillaire, et enfin l'échelle macroscopique où la pâte est homogénéisée. Les deux premières configurations sont analysées en rupture fragile, la

troisième en rupture ductile. On propose ainsi trois modèles de rupture de la pâte qui intègrent le même modèle de rupture du gel de C-S-H établi dans le chapitre 5.6 et dont la mise en œuvre utilise la méthode de calcul semi-numérique. Pour les trois modèles, on peut soit séparer la porosité capillaire de celle du gel en les considérant à deux échelles différentes, soit considérer toute la porosité à la même échelle. Ces deux variantes sont examinées pour chacun des modèles. On attribue aux phases constitutives de la pâte, autres que le gel de C-S-H et les pores capillaires, une très grande résistance devant celle du gel. Ainsi, la rupture de la pâte n'est induite localement que par une rupture dans les interfaces entre grains de C-S-H. Parmi les critères locaux portant sur ces interfaces, évoquées dans le chapitre 5.6, nous optons pour le critère de Von Mises traduisant une rupture locale par glissement inter-granulaire (critère le plus connu des trois analysés dans le chapitre précédent et mode de rupture nous semblant le plus approprié au gel de C-S-H). Dans ce qui suit, ces trois modèles de rupture sont développés et expliqués individuellement dans le but de déterminer le critère homogénéisé de la pâte.

5.3.1 Modèle de Mori-Tanaka en rupture fragile

Nous considérons dans une première configuration que la microstructure de la pâte est formée d'une matrice faite de gel de C-S-H dans laquelle sont plongées des inclusions de clinker anhydre, des inclusions d'hydrates de plusieurs types (portlandite Afm, Aft, etc) et éventuellement des pores capillaires (voir fig. 5.1). Selon la formulation de la pâte, un ou plusieurs hydrates peuvent entrer en jeu et avoir un effet plus ou moins important sur les propriétés mécaniques globales. Dans cette section, nous nous limiterons au cas d'un seul hydrate autre que le C-S-H, la portlandite par exemple, dont les inclusions sont ellipsoïdales « oblates » aléatoirement orientées. Nous utilisons un schéma de Mori-Tanaka qui se prête le mieux à la modélisation des microstructures à matrice. La matrice pour ce schéma est dotée des propriétés homogénéisées du gel de C-S-H. Les inclusions de clinker anhydre ainsi que les pores capillaires sont sphériques. La résolution de ce schéma de Mori-Tanaka se fait de manière classique en résolvant autant de problèmes d'Eshelby que de types d'inclusions considérés. Cette résolution, décrite brièvement par les équations

qui suivent, permet non seulement d'obtenir la rigidité homogénéisée mais également de relier la contrainte, macroscopique appliquée à la pâte de ciment, à la contrainte moyenne dans le gel de C-S-H.

Les tenseurs de concentration de la déformation permettent de relier la déformation

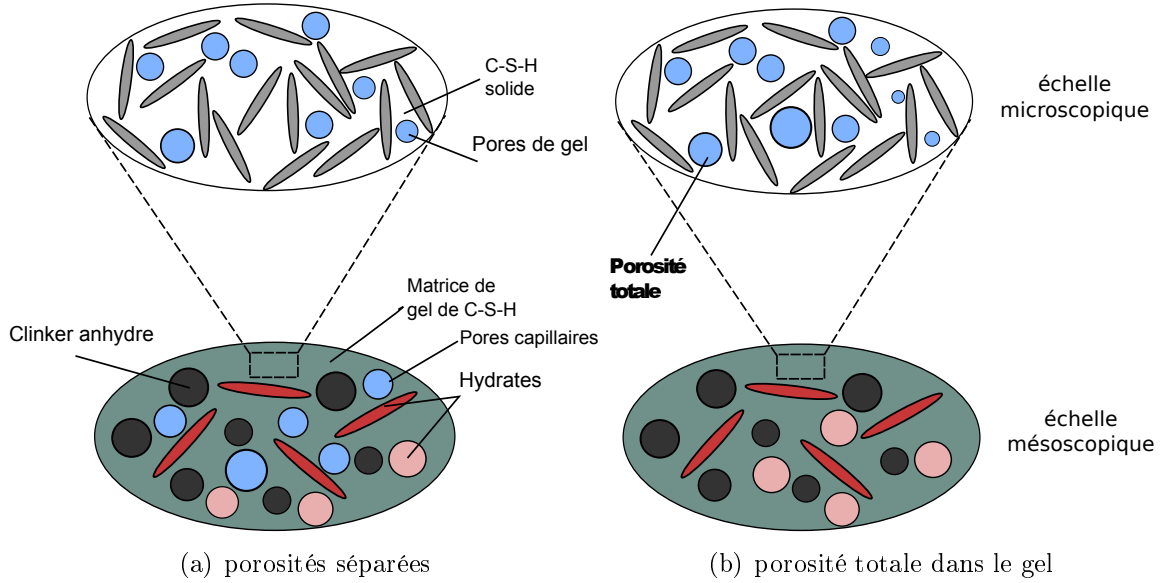


FIGURE 5.1 – Première configuration microstructurale (en composite à matrice) pour la pâte de ciment

macroscopique imposée à un V.E.R de pâte à la déformation moyenne dans chacune des phases constitutives. L'expression générale du tenseur de concentration de la déformation pour une phase r donnée dans le cadre d'une approche de Mori-Tanaka s'écrit comme suit :

$$\overline{\mathbf{A}}_r = [\mathbb{I} + \mathbb{P}_r^m : (\mathbb{C}_r - \mathbb{C}_m)]^{-1} : \overline{[\mathbb{I} + \mathbb{P}_r^m : (\mathbb{C}_r - \mathbb{C}_m)]^{-1}}^{-1} \quad (5.4)$$

où \mathbb{C}_m est la rigidité de la matrice, \mathbb{C}_r la rigidité de la phase r concernée, \mathbb{P}_r^m le tenseur de Hill d'une inclusion de cette phase r plongée dans une matrice de rigidité \mathbb{C}_m .

Avec ces notations et en suivant l'expression (5.4), le tenseur de concentration de la

déformation s'écrit pour la matrice comme suit :

$$\begin{aligned} \overline{\mathbb{A}}_m = & \{f_m \mathbb{I} + f_{cap}(\mathbb{I} - \mathbb{P}_{sph}^m : \mathbb{C}_m)^{-1} + f_{clin}[\mathbb{I} + \mathbb{P}_{sph}^m : (\mathbb{C}_{clin} - \mathbb{C}_m)]^{-1} \\ & + f_{port} \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \frac{\sin \theta}{4\pi} [\mathbb{I} + \mathbb{P}_{port}^m : (\mathbb{C}_{port} - \mathbb{C}_m)]^{-1} d\theta d\phi\}^{-1} \end{aligned} \quad (5.5)$$

où f_m , f_{cap} , f_{clin} et f_{port} représentent respectivement les fractions volumiques de la matrice, des pores capillaires, du clinker anhydre, et de la portlandite. \mathbb{C}_m , \mathbb{C}_{clin} et \mathbb{C}_{port} désignent respectivement les rigidités de la matrice (rigidité homogénéisée du gel de C-S-H), du clinker et de la portlandite. \mathbb{P}_{sph}^m et \mathbb{P}_{port}^m représentent successivement le tenseur de Hill d'une inclusion sphérique et celui d'une inclusion ellipsoïdale de portlandite plongées dans une matrice infinie de rigidité \mathbb{C}_m .

Le tenseur de concentration de la déformation pour la portlandite s'écrit quant à lui comme suit :

$$\overline{\mathbb{A}}_{port} = \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \frac{\sin \theta}{4\pi} [\mathbb{I} + \mathbb{P}_{port}^m : (\mathbb{C}_{port} - \mathbb{C}_m)]^{-1} d\theta d\phi : \overline{\mathbb{A}}_m \quad (5.6)$$

Le terme en double intégrale dans les équations (5.5) et (5.6) est dû à une prise de moyenne sur toutes les orientations possibles des inclusions de portlandite.

Le tenseur de concentration de la déformation s'écrit pour la phase de clinker anhydre comme suit :

$$\overline{\mathbb{A}}_{clin} = [\mathbb{I} + \mathbb{P}_{sph}^m : (\mathbb{C}_{clin} - \mathbb{C}_m)]^{-1} : \overline{\mathbb{A}}_m \quad (5.7)$$

En revanche celui des pores capillaires est donné par :

$$\overline{\mathbb{A}}_{cap} = (\mathbb{I} - \mathbb{P}_{sph}^m : \mathbb{C}_m)^{-1} : \overline{\mathbb{A}}_m \quad (5.8)$$

Ces tenseurs permettent de donner l'estimation de Mori-Tanaka de la rigidité homogénéisée sous la forme :

$$\mathbb{C}_{hom} = f_m \mathbb{C}_m : \overline{\mathbb{A}}_m + f_{clin} \mathbb{C}_{clin} : \overline{\mathbb{A}}_{clin} + f_{port} \mathbb{C}_{port} : \overline{\mathbb{A}}_{port} \quad (5.9)$$

On peut également relier la contrainte macroscopique appliquée au VER de pâte de ciment à la contrainte moyenne régnant dans le gel de C-S-H par l'estimateur de Mori-Tanaka :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C}_{hom} : \overline{\mathbb{A}}_m^{-1} : \mathbb{C}_m^{-1} : \overline{\boldsymbol{\sigma}}_m \quad (5.10)$$

où Σ est la contrainte macroscopique dans la pâte de ciment et σ_m la contrainte régnant dans la matrice (gel de C-S-H).

De cette manière, puisque le critère homogénéisé du gel de C-S-H, obtenu dans le chapitre 5.6, porte sur cette contrainte moyenne σ_m régnant dans le gel, on peut déduire, à l'aide de l'équation 5.10, un critère portant sur la contrainte macroscopique de la pâte. On considère de cette façon que la rupture de la pâte est aussi fragile. En effet lorsque le critère du gel de C-S-H est atteint, le critère de la pâte est également atteint. La seule différence est que le premier critère porte sur la contrainte du gel alors que le deuxième porte sur la contrainte macroscopique de la pâte. Ainsi en admettant un chargement en contrainte Σ axisymétrique (4.37) appliqué à un V.E.R de pâte de ciment, on peut tracer le critère de rupture homogénéisé de celle-ci dans le plan (Σ_m, Σ_d) (fig.5.4) conjointement avec celui du gel de C-S-H.

5.3.2 Modèle auto-cohérent en rupture fragile

Nous développons, ensuite, un modèle basé sur une autre configuration microstructurale de la pâte. Celle-ci est considérée comme un matériau granulaire (sans matrice) dans lequel le gel de C-S-H homogénéisé est disposé en inclusions sphériques homogènes (fig.5.2). Les autres phases ont la même disposition en inclusions que dans le dernier modèle. Les tenseurs de localisation de la déformation, permettant de déterminer la rigidité homogénéisée et de relier entre déformation ou contrainte macroscopique et déformations ou contraintes moyennes dans les phases, sont toujours définis par l'équation générale (5.4) dans laquelle la rigidité de la matrice C_m est remplacée par la rigidité homogénéisée

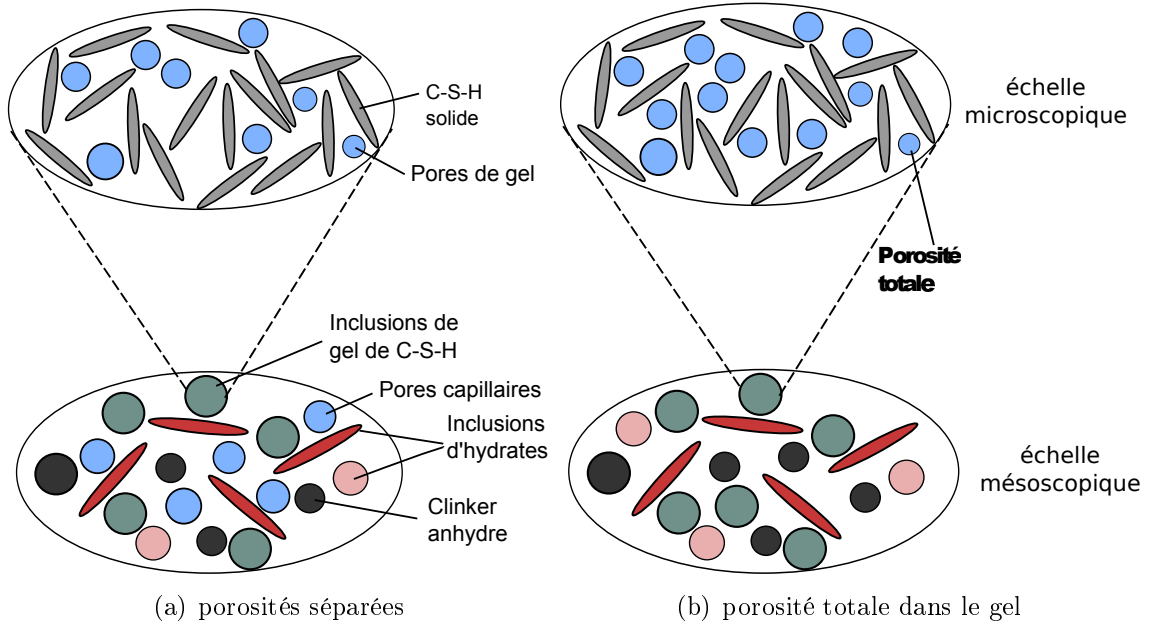


FIGURE 5.2 – Deuxième configuration microstructurale (en composite granulaire) pour la pâte de ciment

auto-cohérente \mathbb{C}_{sc} . On a ainsi :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{\mathbb{A}}_{clin} = \bar{\mathbb{A}}'_{clin} : \bar{\mathbb{A}}'^{-1} \\ \bar{\mathbb{A}}_{port} = \bar{\mathbb{A}}'_{port} : \bar{\mathbb{A}}'^{-1} \\ \bar{\mathbb{A}}_{cap} = \bar{\mathbb{A}}'_{cap} : \bar{\mathbb{A}}'^{-1} \\ \bar{\mathbb{A}}_{gel} = \bar{\mathbb{A}}'_{gel} : \bar{\mathbb{A}}'^{-1} \end{array} \right. \quad \text{avec} \quad \left\{ \begin{array}{l} \bar{\mathbb{A}}'_{clin} = [\mathbb{I} + \mathbb{P}_{sph}^{sc} : (\mathbb{C}_{clin} - \mathbb{C}_{sc})]^{-1} \\ \bar{\mathbb{A}}'_{port} = \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} [\mathbb{I} + \mathbb{P}_{port}^{sc} : (\mathbb{C}_{port} - \mathbb{C}_{sc})]^{-1} \frac{\sin \theta}{4\pi} d\theta d\phi \\ \bar{\mathbb{A}}'_{cap} = (\mathbb{I} - \mathbb{P}_{sph}^{sc} : \mathbb{C}_{sc})^{-1} \\ \bar{\mathbb{A}}'_{gel} = [\mathbb{I} + \mathbb{P}_{sph}^{sc} : (\mathbb{C}_{gel} - \mathbb{C}_{sc})]^{-1} \\ \bar{\mathbb{A}}'^{-1} = (f_{clin} \bar{\mathbb{A}}'_{clin} + f_{port} \bar{\mathbb{A}}'_{port} + f_{cap} \bar{\mathbb{A}}'_{cap} + f_{gel} \bar{\mathbb{A}}'_{gel})^{-1} \end{array} \right. \quad (5.11)$$

où \mathbb{P}_{port} et \mathbb{P}_{sph} représentent successivement le tenseur de Hill d'une inclusion sphérique ainsi que celui d'une inclusion ellipsoïdale de portlandite plongées dans une matrice infinie de rigidité \mathbb{C}_{sc} . \mathbb{C}_{gel} est la rigidité du gel de C-S-H qui ne joue plus le rôle de matrice dans ce schéma. et f_{gel} est sa fraction volumique dans le mélange. La rigidité homogénéisée est alors déterminée en résolvant l'équation :

$$\mathbb{C}_{sc} = f_{gel} \mathbb{C}_{gel} : \bar{\mathbb{A}}_{gel} + f_{clin} \mathbb{C}_{clin} : \bar{\mathbb{A}}_{clin} + f_{port} \mathbb{C}_{port} : \bar{\mathbb{A}}_{port} \quad (5.12)$$

La détermination de cette rigidité homogénéisée nous permet de relier la contrainte macroscopique dans la pâte à la contrainte moyenne dans le gel :

$$\Sigma = \mathbb{C}_{sc} : \overline{\mathbb{A}_{gel}^{-1}} : \mathbb{C}_{gel}^{-1} : \overline{\sigma_{gel}} \quad (5.13)$$

Ainsi on peut déterminer le critère homogénéisé de la pâte dû au critère du gel de C-S-H. Ces deux critères sont reportés dans le plan (Σ_m, Σ_d) (fig.5.4)

5.3.3 Modèle de Mori-Tanaka en rupture ductile

Dans ce modèle, la configuration microstructurale admise pour la pâte de ciment est semblable à celle du premier modèle (Mori-Tanaka en rupture fragile). Le gel de C-S-H forme toujours une matrice dans laquelle baignent les inclusions de clinker et des autres hydrates. Dans un souci de simplification, ces inclusions intervenant à l'échelle mésoscopiques sont toutes considérées sphériques, contrairement à ce qui est prescrit par le tableau 5.1 et adopté dans le premier modèle (fig.5.3). Cette altération de la microstructure réelle a peu d'effet sur la rupture du matériaux sices inclusions sont en fraction faible. On admet en plus dans le présent modèle que le comportement de la pâte de ciment en rupture est ductile. En d'autres termes, malgré une rupture du gel de C-S-H toujours considérée fragile, on suppose que l'on peut observer à l'échelle de la pâte un comportement en rupture avec une certaine ductilité. En effet, rien ne nous permet d'affirmer que la rupture de la pâte de ciment se produit de manière fragile même si elle est due principalement à une rupture fragile du gel de C-S-H. Dans le chapitre précédent, on a pu observer que le critère homogénéisé du gel de C-S-H pouvait s'apparenter, dans certains cas, à un domaine elliptique qui est dédoublé dans le plan (Σ_m, Σ_d) (deux domaines elliptiques distincts). On a montré que ce dédoublement était dû à une dépendance du troisième invariant de la contrainte macroscopique. Lorsque cette dépendance est négligeable, nous pouvons approximer les deux domaines elliptiques par un seul. En revanche lorsque cette dépendance est accentuée la représentation dans le plan (Σ_m, Σ_d) n'est pas appropriée et seule une représentation en 3D permet de visualiser correctement le critère. Nous adoptons, dans cette section, une méthode de changement

d'échelle qui nous permet de passer du critère elliptique d'une des phases constitutives (en l'occurrence le gel de C-S-H) au critère du matériau homogénéisé (la pâte de ciment), dans le cadre d'une rupture ductile [Dormieux et al., 2006]. Cette méthode, telle que décrite ci-dessous, ne peut donc être appliquée que dans le cas où le critère peut être représenté dans le plan (Σ_m, Σ_d) . Le cas d'une forte dépendance du troisième invariant, n'est par conséquent pas traité. Avant de présenter cette méthode, on rappelle tout d'abord que

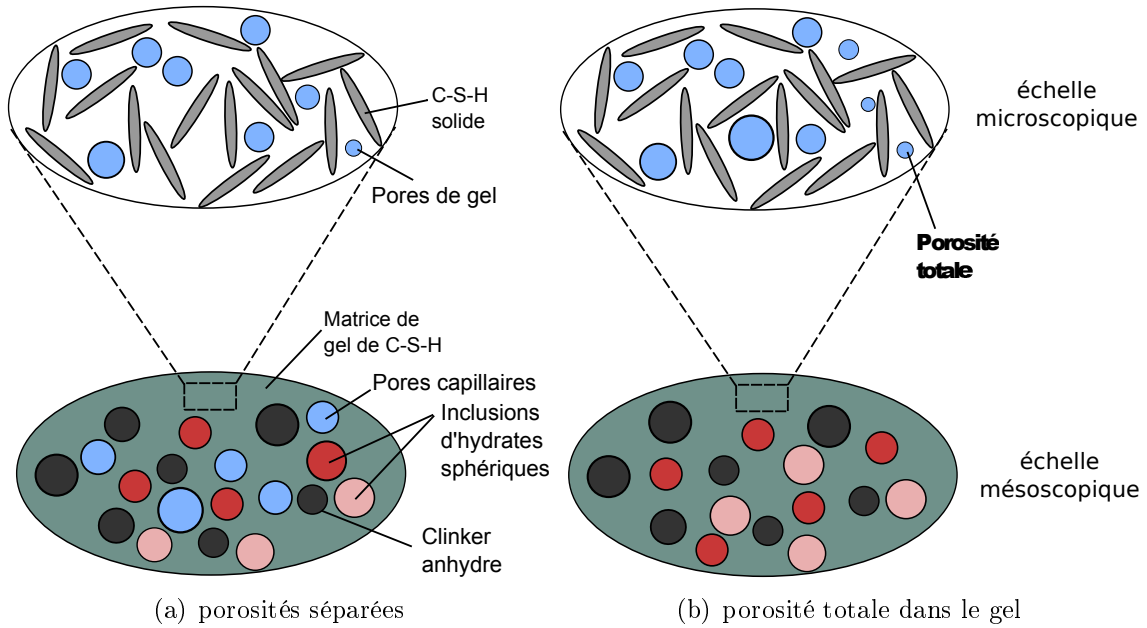


FIGURE 5.3 – Troisième configuration microstructurale (en composite à matrice) pour la pâte de ciment

le critère de la matrice (gel de C-S-H) peut être approximé dans le plan (Σ_m, Σ_d) par un critère elliptique défini par l'équation suivante :

$$f_m(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\sigma_m^2}{a} + \frac{\sigma_d^2}{b} - 1 \leq 0 \quad (5.14)$$

où σ_m et σ_d représentent successivement la contrainte moyenne et déviatorique du gel de C-S-H (notés Σ_m et Σ_d dans le chapitre précédent)¹.

La méthode de changement d'échelle commence par introduire un problème aux limites

1. Le changement de notation est dû au fait que l'on travaille à l'échelle mésoscopique où le gel est homogénéisé.

posé sur le V.E.R à résoudre pour déterminer le critère homogénéisé de la pâte. Dans ce problème, la fonction d'appui joue le rôle de potentiel pour l'écriture de l'équation d'état [Leblond et al., 1994] :

$$\begin{cases} \operatorname{div} \sigma = 0 \text{ sur } (\omega) \\ \sigma = \partial \frac{\pi(\mathbf{d})}{\partial \mathbf{d}} \text{ sur } (\omega) \\ \mathbf{d} = \nabla \underline{v} \text{ sur } (\omega) \\ \underline{v} = \mathbf{D} \cdot \underline{z} \text{ sur } (\partial\omega) \end{cases} \quad (5.15)$$

ω représentant le V.E.R, \underline{z} le vecteur position, \underline{v} la vitesse, \mathbf{d} et \mathbf{D} les taux de déformation mésoscopique et macroscopique et π la fonction d'appui de l'une des phases.

Puisqu'on considère toutes les phases infiniment résistantes, les conditions de ce problème peuvent être réécrites comme suit :

$$\begin{cases} \operatorname{div} \sigma = 0 \text{ sur } (\omega) \\ \sigma = \partial \frac{\pi_m(\mathbf{d})}{\partial \mathbf{d}} = \mathbb{C}_m(\mathbf{d}) : \mathbf{d} \text{ sur } (\omega_m) \\ \sigma = \mathbb{C}_i : \mathbf{d} \text{ sur } (\omega_i) \text{ avec } \mathbb{C}_i \rightarrow \infty \quad i = \{port, clin\} \\ \sigma = 0 \text{ sur } (\omega_{cap}) \\ \mathbf{d} = \nabla^s \underline{v} \text{ sur } (\omega) \\ \underline{v} = \mathbf{D} \cdot \underline{z} \text{ sur } (\partial\omega) \end{cases} \quad (5.16)$$

La résolution de ce problème revient à la résolution tout d'abord du problème linéaire équivalent dont les conditions sont les mêmes que ceux de (5.16) à une exception près ; celle de considérer une rigidité \mathbb{C}_m "effective" pour la matrice indépendante de \mathbf{d} . Cette rigidité est définie comme suit :

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_m &= 3k_m \mathbb{J} + 2\mu_m \mathbb{K} \\ \text{avec} \quad & \begin{cases} k_m = \frac{a}{\sqrt{ad_v^2 + bd_d^2}} \\ \mu_m = \frac{b}{\sqrt{ad_v^2 + bd_d^2}} \end{cases} \end{aligned} \quad (5.17)$$

La dépendance de cette rigidité vis à vis de \mathbf{d} est gérée en moyenne en estimant d_v et d_d par d_v^{eff} et d_d^{eff} dont les expressions sont les suivantes :

$$(dv^{eff})^2 = \frac{2}{f_m} \frac{\partial \psi(\mathbf{D})}{\partial k_m} (dd^{eff})^2 = \frac{1}{f_m} \frac{\partial \psi(\mathbf{D})}{\partial k_m} \quad (5.18)$$

où $\psi(\mathbf{D})$ représente l'énergie du problème linéaire donnée par :

$$\psi(\mathbf{D}) = \frac{1}{2} \mathbf{D} : \mathbb{C}_{hom} : \mathbf{D} \quad (5.19)$$

Ainsi, la résolution du problème linéaire équivaut avec une rigidité de la matrice telle que définie par (5.17) permet d'obtenir la rigidité homogénéisée \mathbb{C}_{hom} en fonction des composantes de \mathbf{D} (volumique D_v et déviatorique D_d). Cette rigidité relie la contrainte et le taux de déformation macroscopique :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C}_{hom}(D_v, D_d) : \mathbf{D} \quad (5.20)$$

On peut, à partir de cette équation tensorielle, éliminer les composantes du taux de déformation (D_v et D_d) au profit de Σ_m et Σ_d . Une équation reliant ces deux composantes de la contrainte macroscopique permet de tracer le critère homogénéisé (fig.5.4). Ce critère est présenté à titre démonstratif. Il ne peut être validé sur les données expérimentales de la section suivante car celles-ci peuvent exhiber, selon la formulation et les valeurs des paramètres, un effet du troisième invariant plus ou moins accentué.

Dans la figure 5.4 on peut comparer les critères homogénéisés obtenus par les modèles de rupture fragile ou ductile pour la pâte de ciment. Ces résultats encore préliminaires appellent à une confirmation par des examens complémentaires. Néanmoins, ils suggèrent des différences quantitatives considérables selon la nature de la rupture.

5.4 Données expérimentales sur les pâtes de ciment

Dans cette section, nous regroupons des données expérimentales de plusieurs pâtes de ciments de formulations différentes. Ces données sont issues d'un travail de [Termkhajornkit et al., 2014] et utilisées pour valider expérimentalement un modèle de pâte de ciment [Pichler et al., 2013, Termkhajornkit et al., 2014] basé sur une rupture

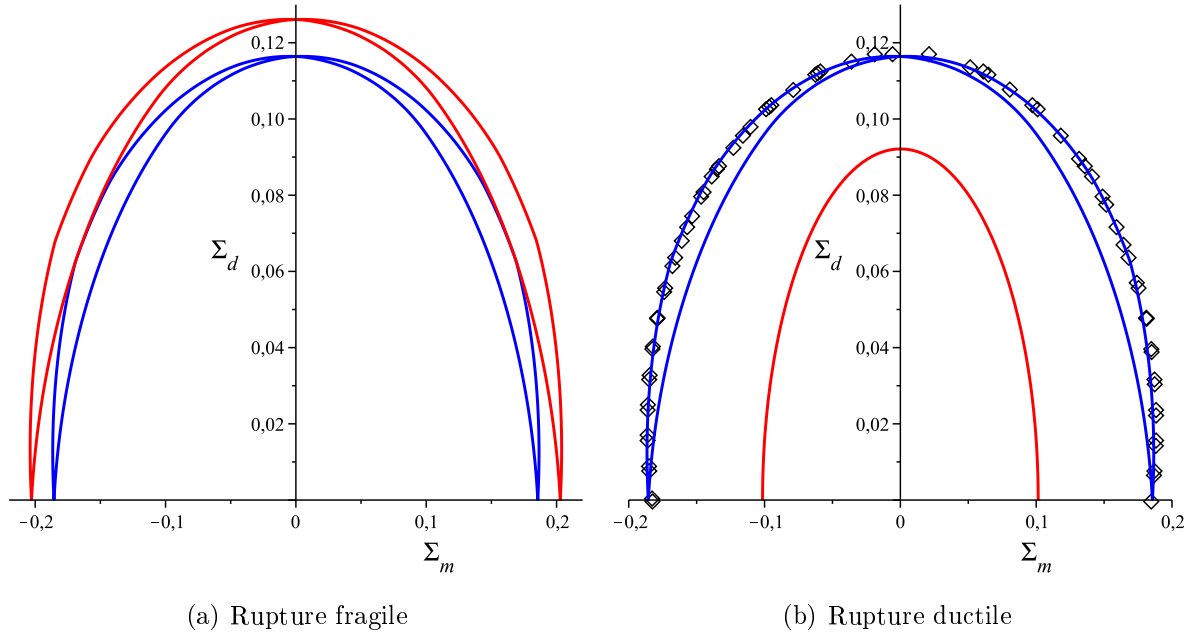


FIGURE 5.4 – Critères homogénéisés de la pâte obtenus par les différents modèles (en rouge) et critère du gel de C-S-H (en bleu) approximé pour le cas ductile (par losanges) (Mori-Tanaka et autocohérent donnant le même critère dans le cas fragile pour les données choisies $f_{gel} = 0.7$, $f_{port} = 0.1$, $f_{clin} = 0.1$, $f_{cap} = 0.1$)

intra-granulaire dans le gel de C-S-H (contrairement à la rupture inter-granulaire qu'on admet dans ce travail). Dans ce travail des essais de compression uniaxiale sont réalisés sur des pâtes de formulations plus ou moins complexes et à différents états d'avancement. Les formulations envisagées sont les suivantes :

- pâte d'Alite : contenant du gel de C-S-H (avec sa porosité), de la porosité capillaire, du clinker anhydre (Alite C_3S) et de la portlandite en faible fraction.
- pâte de Béliste : contenant du gel de C-S-H, de la porosité capillaire, du clinker anhydre (Béliste C_2S) et de la portlandite en faible fraction.
- Pâte 1 : C3S/C3A+3%SO3 DX avec alumine : contenant du gel, des pore capillaires, de l'anhydre de C3S et C3A, de la portlandite, du monosulfoaluminate, de l'étringite et 3% d'anhydre sulfurique.
- Pâte 2 : C3S/C3A+2,88%SO3+4%BL200 DX avec alumine : ayant une composition

semblable à la dernière pâte avec en plus 4% de filler de calcaire

- Pâte 3 : C3S/C3A+8,86%SO3 DX avec alumine.
- Pâte 4 : C3S+C3A+3%SO3 DX avec alumine : un mélange de C3S et C3A.

Les données de résistance à la compression de ces différentes pâtes, en fonction de la porosité capillaire, sont illustrées dans les figures (fig.5.6). Pour toutes ces données la porosité du gel de C-S-H est considérée constante et fixée à 40%

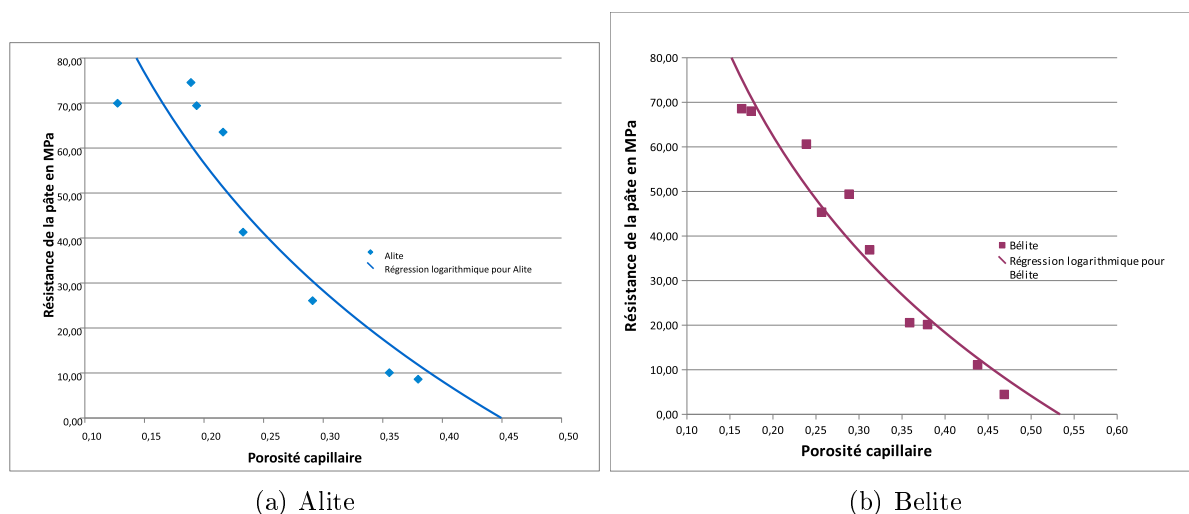


FIGURE 5.5 – Résistances des pâtes d'Alite et de Belite testées en fonction de la porosité capillaire (la porosité du gel étant considérée à 40%)

5.5 Validation et calage des modèles de ruptures de la pâtes par données expérimentales

Dans cette section nous essayons de valider les modèles, de rupture de la pâte de ciment, proposés dans la section 5.3 par les données expérimentales de résistances à la compression trouvées dans la littérature [Termkhajornkit et al., 2014] et présentées en section 5.4. Certains paramètres des modèles sont estimés ou calés sur quelques données expérimentales. Nous vérifions la validité et la précision de chaque modèle en comparant ses prédictions en matière de résistance à la compression et en le confrontant avec le modèle de la littérature basé sur une rupture intra-granulaire.

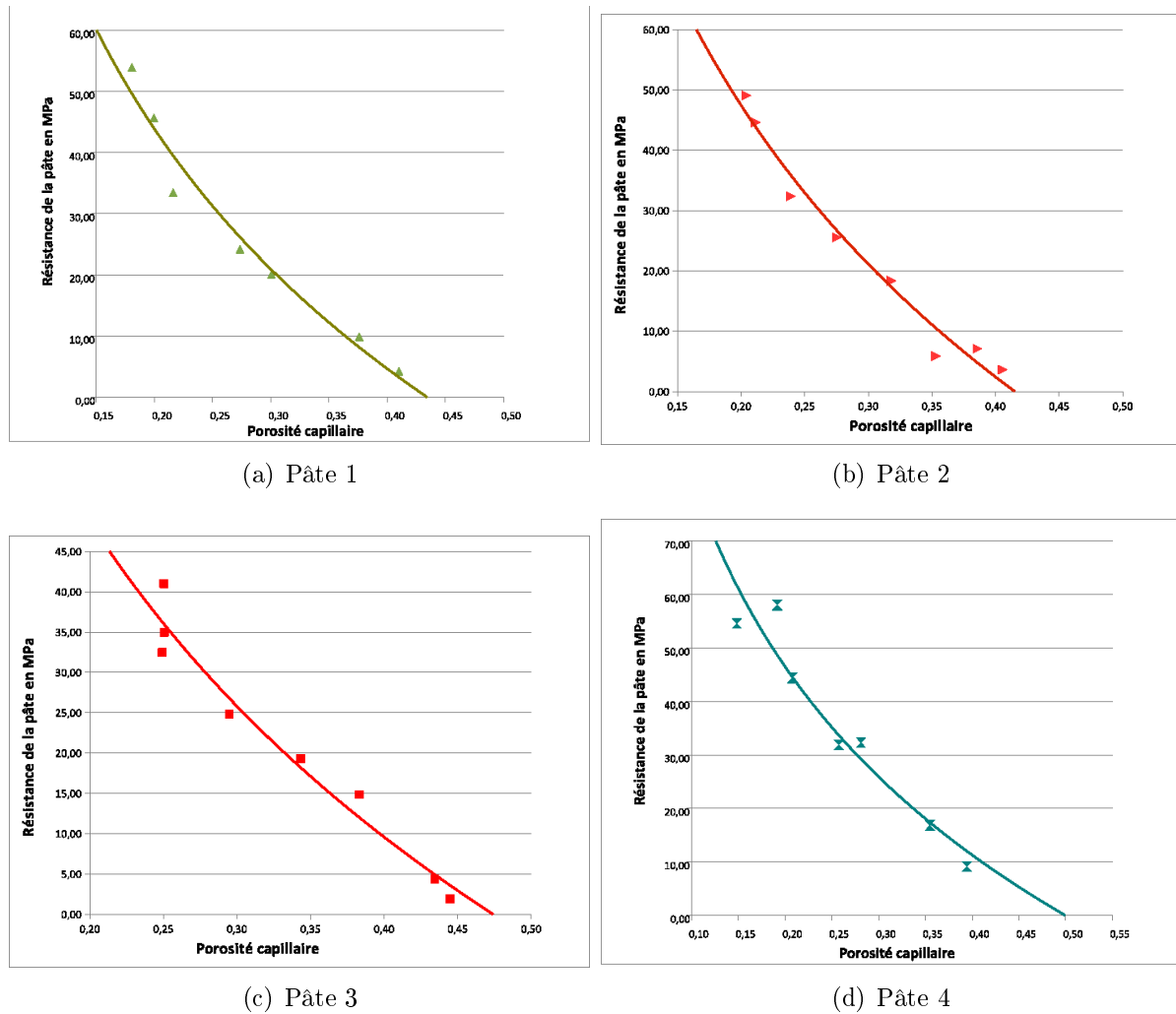


FIGURE 5.6 – Résistances expérimentales des pâtes de ciments testées en fonction de la porosité capillaire (la porosité du gel étant considérée à 40%)

5.5.1 Paramètres de calage

Avant de pouvoir exploiter les modèles et examiner leurs résultats, il est essentiel de disposer des valeurs de tous les paramètres auxquels les modèles font appel. Certains, de ces paramètres, sont mesurables (tels que la porosité capillaire, les modules élastiques de chaque phase) d'autres sont imposées par la formulation de la pâte (fractions volumiques des phases). Pour le reste, à défaut d'avoir les valeurs exactes on peut utiliser une estimation ou juste un ordre de grandeur si leur influence sur la résistance n'est pas très

importante. Ceci dit, on retiendra deux paramètres figurant dans les trois modèles dont l'estimation est délicate, à savoir : la limite du critère de rupture dans les interfaces T_{cr} et le ratio χ des surfaces de contact entre grains sur les surfaces totales des grains. Le premier est déterminé par calage puisqu'on ne dispose d'aucun moyen pour l'estimer. En revanche, pour le deuxième paramètre χ , on dispose d'une expression théorique pour le cas d'inclusions sphérique [Sanahuja, 2008] :

$$\chi_{sph} = (1 - f_{p.gel})(1 - 2f_{p.gel}) \quad (5.21)$$

où $f_{p.gel}$ représente la porosité du gel de C-S-H. L'expression (5.21) a prouvé son efficacité dans le cas d'inclusions sphériques et a été validée numériquement dans le travail [Sanahuja, 2008]. En revanche, le raisonnement sur lequel elle se base n'est pas généralisable à la morphologie inclusionnaire ellipsoïdale qu'on examine dans ce travail. On peut cependant relever que cette expression s'annule lorsque la porosité du gel atteint la valeur 0.5. Cette valeur correspond à la porosité de percolation du schéma auto-cohérent avec inclusions sphériques. On peut alors proposer une expression semblable du paramètre χ valable dans le cas d'inclusions ellipsoïdales. Celle-ci est choisie de manière à ce qu'elle soit nulle lorsque la porosité du gel atteint la porosité de percolation du schéma auto-cohérent avec inclusions ellipsoïdales :

$$\chi_{ell} = (1 - f_{p.gel})(1 - f_{p.gel}/f_{per}) \quad (5.22)$$

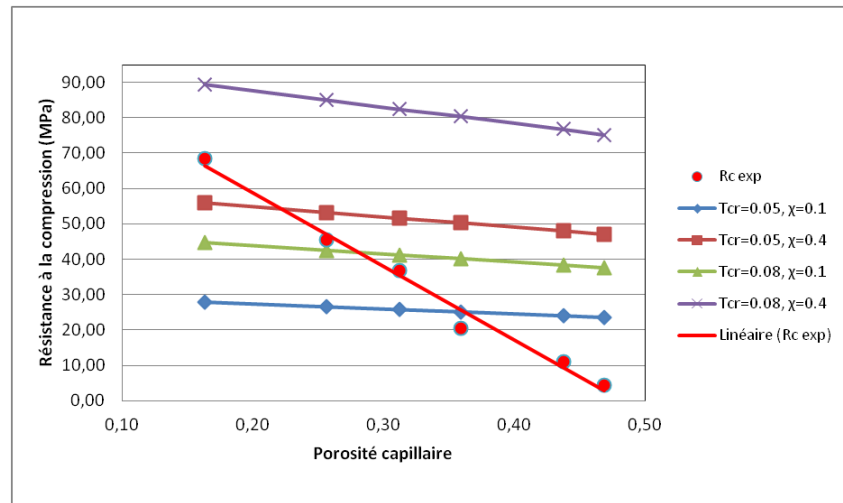
La porosité de percolation f_{per} dépend bien sûr du rapport d'aspect des inclusions ellipsoïdales.

Nous justifions l'utilisation de l'expression (5.22) dans les modèles de rupture en section 5.5.3.

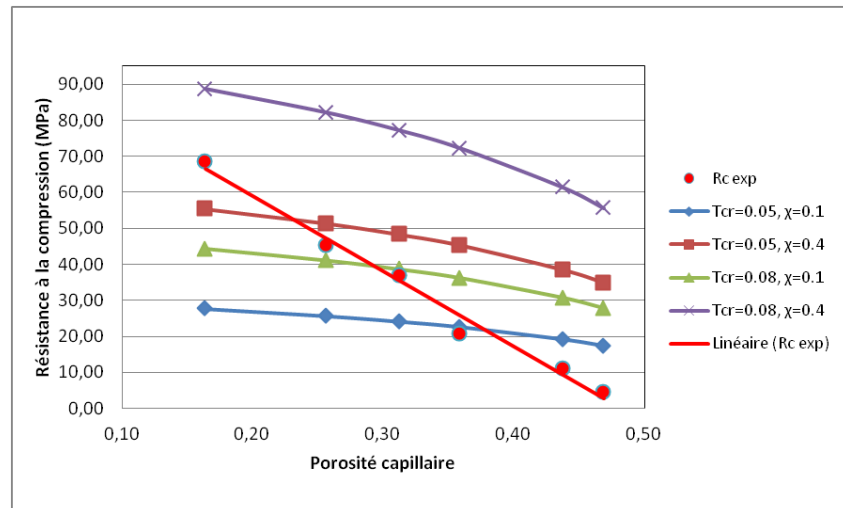
5.5.2 Calage des modèles dans le cas d'une porosité séparée

Dans cette section, nous reprenons les modèles de rupture de la pâte de ciment, tels que décrits en section 5.3, pour les valider sur les données expérimentales. Dans ces modèles, la porosité propre du gel de C-S-H est homogénéisée avec les grains de C-S-H

à l'échelle du gel alors que la porosité capillaire est homogénéisée à l'échelle supérieure avec les constituants de la pâte de ciment (figures 5.1.a, 5.2.a et 5.3.a). Les données expérimentales dont on dispose [Termkhajornkit et al., 2014] supposent la porosité de gel fixe, égale à 40%. Ne disposant pas de données supplémentaires sur l'évolution de cette porosité en fonction de l'hydratation du ciment, nous sommes contraints d'admettre cette hypothèse qui limite la possibilité de caler les modèles. En effet, le paramètre χ , pour un matériau granulaire à inclusions ellipsoïdales identiques, ne dépend à priori que de sa porosité propre et du rapport d'aspect à travers la porosité de percolation. Ainsi si l'on considère une certaine valeur pour le rapport d'aspect des inclusions du gel (15 par exemple), la porosité de percolation est alors fixée et avec l'hypothèse d'une porosité de gel constante de 40%, on se retrouve avec un paramètre de calage χ constant sur toutes les données. Nous essayons donc de caler les deux premiers modèles de rupture uniquement, à savoir le modèle de Mori-Tanaka et le modèle auto-cohérent en rupture fragile, à l'aide de deux paramètres T_{cr} et χ constants sur l'ensemble des données et ayant une grande influence sur les prédictions des modèles. Pour cela, plusieurs valeurs du couple (T_{cr}, χ) sont testés en vue de faire correspondre les résultats de chacun des deux modèles avec les données expérimentales de la pâte de bélite (fig.5.7). On aperçoit alors que la variation de T_{cr} et de χ , simultanément ou de manière indépendante, ne produit qu'une translation verticale de la courbe des résistances prédites et n'a aucune influence sur la pente de cette courbe. En aucun cas cette pente ne peut égaler celle de la courbe formée par les données expérimentales. Cette remarque est valable pour les deux premiers modèles de rupture (fig.5.7) et elle l'est probablement aussi pour le troisième puisqu'en cas de séparation de porosités le paramètre χ est aussi constant dans ce modèle. On explore ensuite une autre valeur de la porosité de gel dans le but de rapprocher la pente des résistances prédites par les modèles de celle des résistances expérimentales. Nous essayons donc une deuxième porosité de gel de 28% et on représente les prédictions des deux modèles pour les deux porosités choisies (28% et 40%) et pour différentes valeurs des paramètres χ et T_{cr} (fig.5.8). La modification de la porosité de gel ne semble pas avoir d'effet sur la pente des résistances prédites.



(a) Mori-Tanaka en fragile



(b) Auto-cohérent en fragile

FIGURE 5.7 – Calage des modèles à l'aide des paramètres T_{cr} et χ : cas de porosités séparées

Il reste maintenant à examiner l'effet du rapport d'aspect qui pourrait influencer cette pente des prédictions. On considère donc 4 rapports d'aspect différents : 2, 10 et 15 pour les grains de C-S-H que l'on teste pour les deux premiers modèles avec des valeurs uniques de T_{cr} , χ et $f_{p, gel}$ (fig.5.9). On observe que la variation du rapport d'aspect à χ constant produit le même effet observé avec la porosité de gel, une translation verticale de la

courbe. La pente (ou l'allure) des prédictions est exactement la même pour les différents rapports d'aspect testés.

En conclusion, on ne peut caler les modèles de rupture développés ci-dessus en séparant la porosité capillaire de la porosité de gel lorsque cette dernière est considérée constante dans le gel. Ces schémas, dans leur configuration actuelle, auraient pu être exploités si l'on disposait de données sur l'évolution de la porosité de gel. Cette tentative de calage a servi à examiner l'effet du choix de valeurs constantes des paramètres rapport d'aspect, porosité de gel, T_{cr} et χ . La modification des valeurs de ces paramètres, à porosité de gel constante pour toutes les données, n'a pas permis de changer la pente des prédictions.

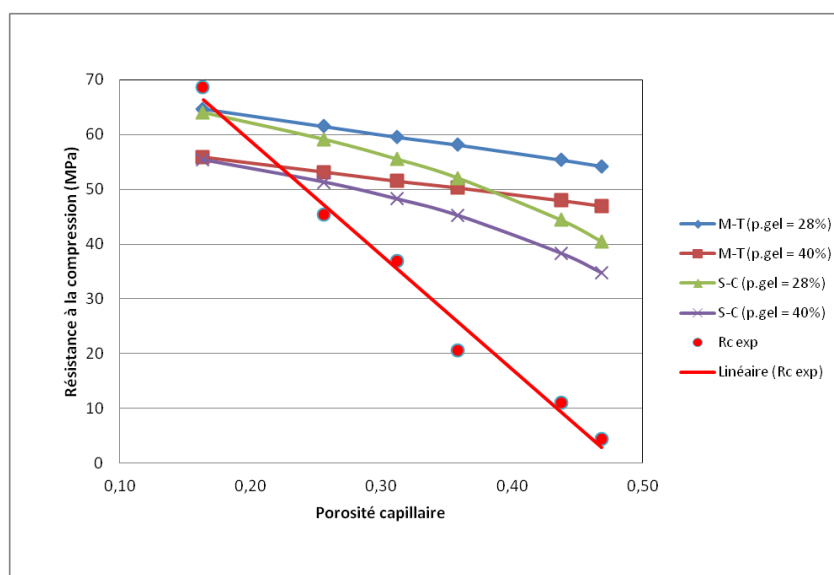
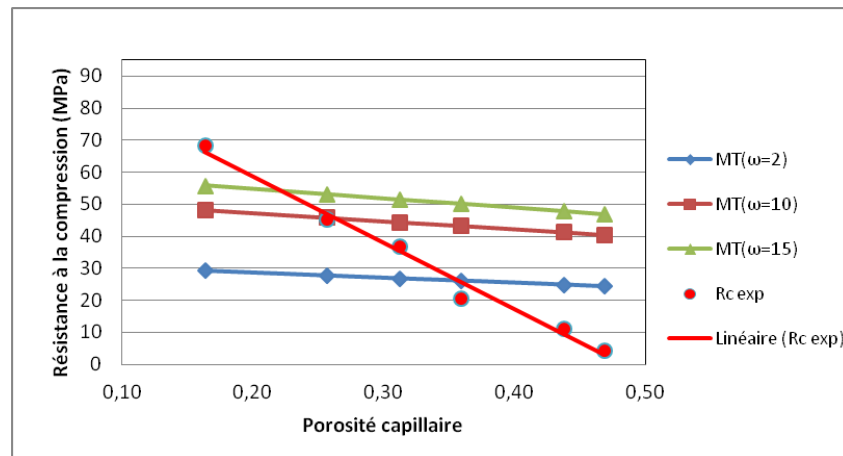
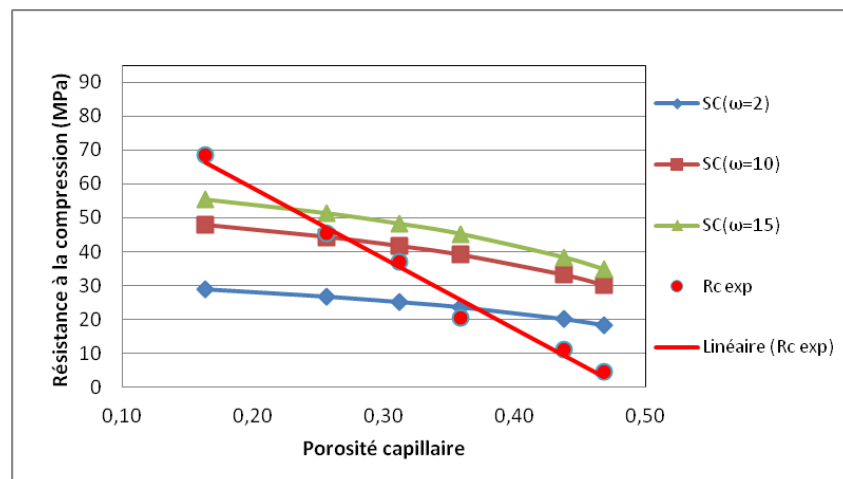


FIGURE 5.8 – Effet de la modification de la porosité de gel sur les prédictions des modèles (en porosités séparées)



(a) Mori-Tanaka en fragile



(b) Auto-cohérent en fragile

FIGURE 5.9 – Effet du rapport d'aspect sur les prédictions des modèles (en porosités séparées)

5.5.3 Calage des modèles dans le cas où la porosité totale est placée dans le gel

Dans cette section nous étudions le cas de figure où la porosité capillaire, la porosité de gel et les grains de C-S-H sont homogénéisés à la même échelle, celle où le gel est hétérogène (échelle microscopique). Ce gel est ensuite homogénéisé avec les hydrates

et le clinker anhydre à une échelle supérieure (échelle mésoscopique), celle où la pâte est hétérogène (figures 5.1.b, 5.2.b et 5.3.b). Cette idée de rassembler les porosités vient du constat que la distribution de taille des pores est continue dans le mélange et qu'il est difficile de définir un seuil entre les pores de gel et les pores capillaires. Des auteurs [Termkhajornkit et al., 2014, Pichler et al., 2013] ont déjà fait cette hypothèse d'homogénéiser la porosité totale à l'échelle du gel dans un modèle micromécanique semblable à celui que l'on propose mais avec une rupture intra-granulaire du gel de C-S-H. Les résultats obtenus étaient concluants.

Dans notre cas, avec un modèle de rupture inter-granulaire, l'exploration de cette hypothèse nous permet d'avoir une valeur de χ différente pour chaque donnée de la porosité totale. En effet, les données sur la porosité totale dont nous disposons varient avec le degré d'hydratation du ciment, contrairement aux données sur la porosité de gel. En considérant cette porosité totale dans le gel le paramètre χ varie également, puisqu'il dépend essentiellement de la porosité du gel. Il nous est alors possible de vérifier si l'expression de χ de l'équation (5.22) peut être utilisée dans les modèles présentés en section 5.3 sans induire trop d'erreur. Pour cela, on choisit arbitrairement une valeur du paramètre T_{cr} qu'on utilise dans les deux modèles de rupture fragile (Mori-Tanaka et auto-cohérent) et on détermine, pour chacun des modèles, les valeurs de χ qui permettent de retrouver les données expérimentales. On obtient des tendances de χ en fonction de la porosité totale dans le gel que nous pouvons comparer à la courbe de la formule théorique (5.22). On observe en figure 5.10 une bonne cohérence entre les valeurs de χ obtenues par calage à T_{cr} fixé et la courbe théorique de l'équation (5.22). Les points obtenus par calage des deux modèles, Mori-Tanaka et auto-cohérent en rupture fragile, ne sont pas semblables, mais ils restent en globalité assez proches de la courbe théorique. Ce résultat nous incite à utiliser la formule théorique (5.22) dans le reste du chapitre pour estimer le paramètre χ lorsque la porosité totale est considérée dans le gel.

Nous nous proposons maintenant de valider les modèles de rupture sur les données présentées plus haut en section 5.4. Nous testerons les deux modèles de rupture fragile sur les données des pâtes d'Alite et de Bélite, pâtes dont la composition est la plus simple. La

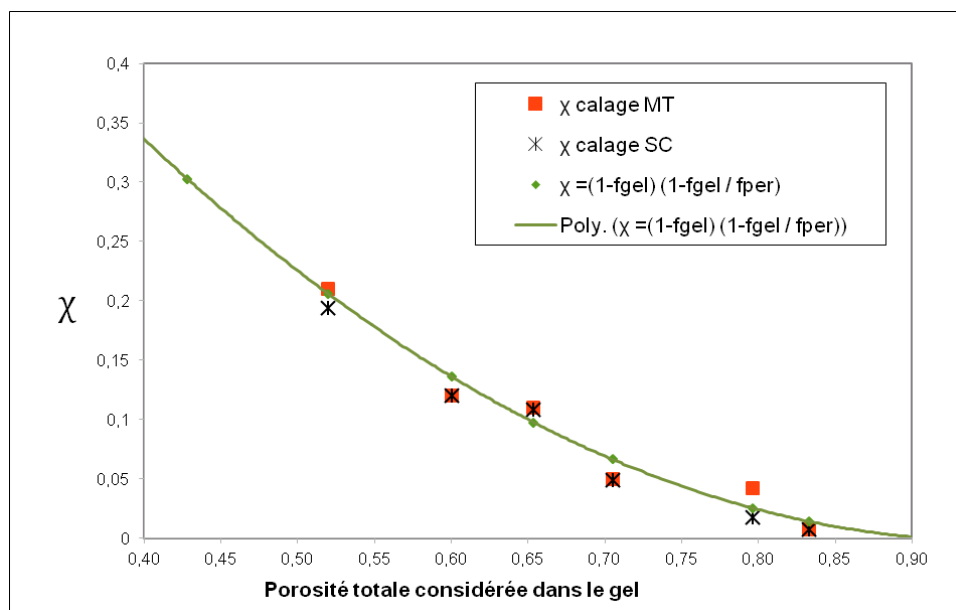


FIGURE 5.10 – Comparaison des valeurs de χ obtenues par calage des deux modèles de rupture fragile avec la formule théorique de (5.22)

formule (5.22) sera utilisée pour estimer χ alors que la valeur de T_{cr} sera calée. Plusieurs rapports d'aspect seront examinés pour ces deux pâtes ($\omega = 10, 12, 15$ et 60). Nous retiendrons les meilleurs rapports pour les utiliser avec les pâtes de compositions plus complexes.

Validation et calages sur les pâtes d'Alite et de Bélite

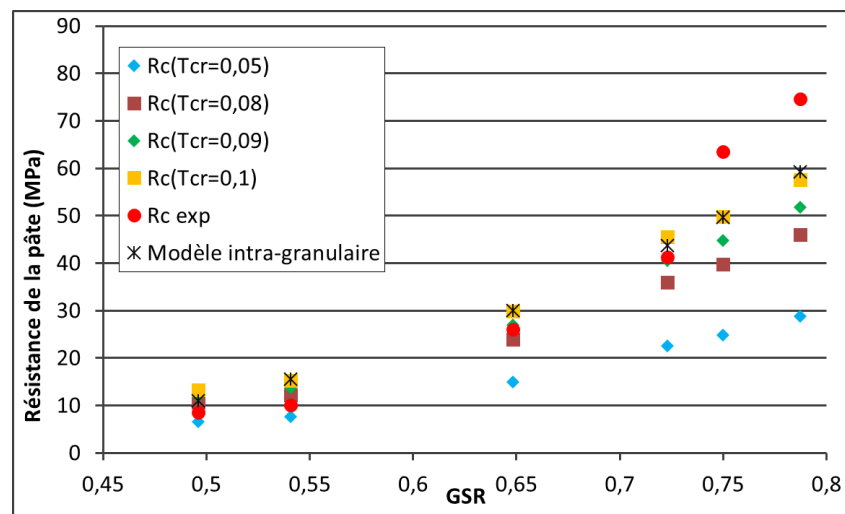
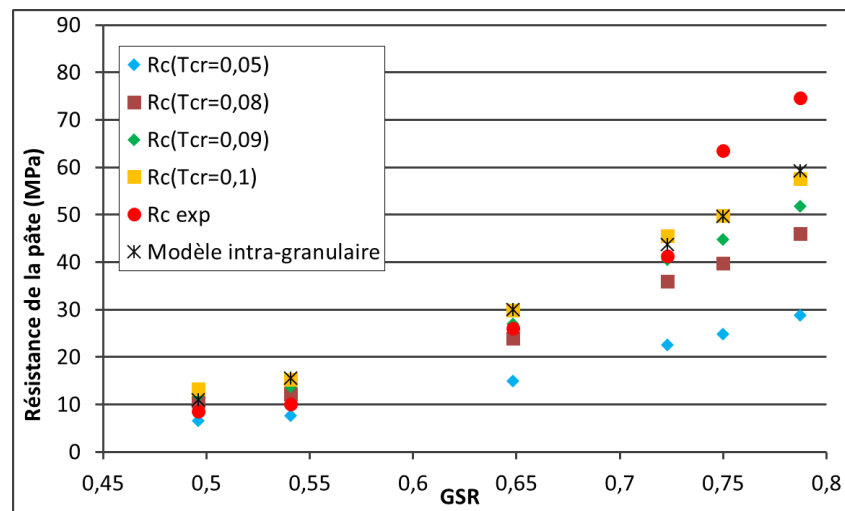
Les pâtes d'Alite et de Bélite ont des compositions assez simples : du gel de C-S-H, des pores, du clinker anhydre (C_3S ou C_2S) et un seul type d'hydrate : la portlandite. Les schémas, de Mori-Tanaka et auto-cohérent, exposés en section 5.3, sont à appliquer tels quels. Nous exposons dans les figures 5.11 et 5.12 le calage du modèle de rupture de Mori-Tanaka en fragile à l'aide du paramètre T_{cr} sur les données de ces deux pâtes et des rapports d'aspect différents (des grains de C-S-H). Nous présentons ensuite dans les figures 5.13 et 5.14 ce calage pour le modèle auto-cohérent en rupture fragile.

A travers ces figures, il est facile de repérer les meilleures prédictions que les deux modèles peuvent donner et la valeur de T_{cr} correspondante en comparant aux données expérimen-

tales des résistances de pâtes. Les deux modèles peuvent également être comparés (une fois calés) à un modèle de la littérature [Termkhajornkit et al., 2014] basé sur une rupture intra-granulaire dans le gel de C-S-H et dont les prédictions sont également retranscrites dans les figures. On remarque, à partir des figures 5.11 et 5.12 que le modèle de Mori-Tanaka en rupture fragile prédit très bien les résistances de la pâte de Bélite et ce avec tous les rapports d'aspect excepté $\omega = 60$ pour lequel les prédictions sont nettement moins bonnes. Pour la pâte d'Alite, les résultats sont en globalité satisfaisants pour les rapports d'aspect autres que 60. La meilleure courbe de prédiction est obtenue pour un rapport d'aspect de 12, dans les deux types de pâte. Il est à noter que dans le cas de l'Alite, le modèle est imprécis pour les données à degré d'avancement important (GSR important). D'ailleurs, le modèle intra-granulaire [Termkhajornkit et al., 2014], qui offre une précision équivalente, présente cette même anomalie pour les GSR importants. On peut expliquer ceci par l'existence et le développement au cours de la réaction d'hydratation de différents types de gels de C-S-H, C-S-H haute densité et C-S-H basse densité (appelés aussi par certains auteurs « Inner products » Ip C-S-H et « Outer products » Op CSH [Richardson, 1999]) ayant des rapports d'aspect différents et des fractions volumiques qui évoluent différemment selon la formulation [Sanahuja, 2008]. Cette hypothèse n'est pas considérée par les modèles présentés dans ce travail. Pour finir avec ce modèle de Mori-Tanaka, on constate, en analysant les résultats pour les différents rapports d'aspect, que la valeur de T_{cr} obtenue par calage n'est pas la même pour la pâte d'Alite et la pâte de Bélite et qu'elle dépend également du rapport d'aspect. La dépendance de la nature de la pâte peut être la conséquence de la même hypothèse présentée plus haut soit l'existence de deux gels de C-S-H ayant des valeurs caractéristiques de T_{cr} différentes et avec des proportions nettement différentes entre la pâte d'Alite et la pâte de Bélite (à cause de la formulation). L'abondance de l'un des deux types de gel de C-S-H dans une pâte peut alors faire pencher le T_{cr} recherché par calage vers celui de ce gel. Par conséquent, on ne peut retenir, à ce stade, de valeur unique de T_{cr} valable pour toutes les pâtes.

L'examen des résultats du modèle auto-cohérent (figures 5.13 et 5.14) montre une moins bonne corrélation entre les résultats prédits et les résultats expérimentaux notamment

pour la pâte d'Alite. Les résistances de la pâte de Bélite demeurent relativement bien prédites avec un rapport d'aspect de 12 ou de 15. On peut conclure de ce qui précède que la pâte d'Alite ne se prête vraisemblablement pas bien à une modélisation en composite granulaire et que la modélisation en composite à matrice semble être plus appropriée. Ce modèle pourrait éventuellement donner de meilleures prédictions pour les pâtes testées dans la suite de ce chapitre. Celles-ci contiennent, en effet, une multitude de phases inclusionnaires les rapprochant d'une microstructure granulaire.

(a) $\omega=10$ (b) $\omega=12$

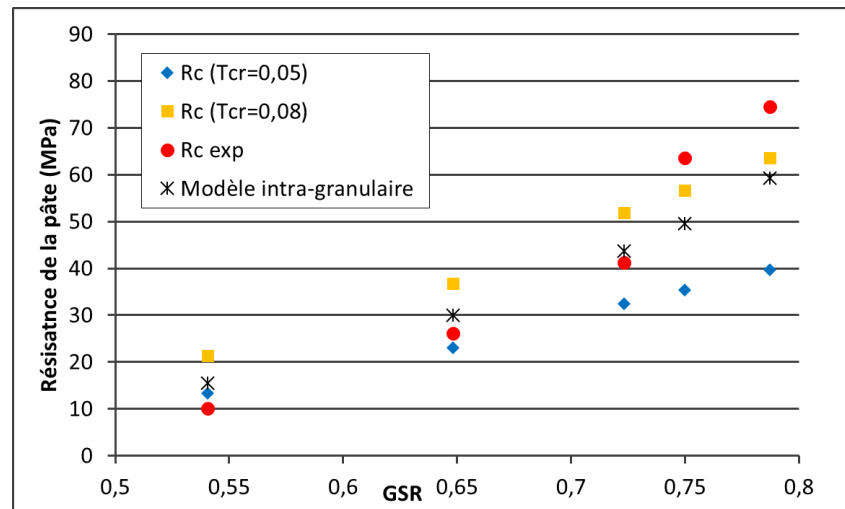
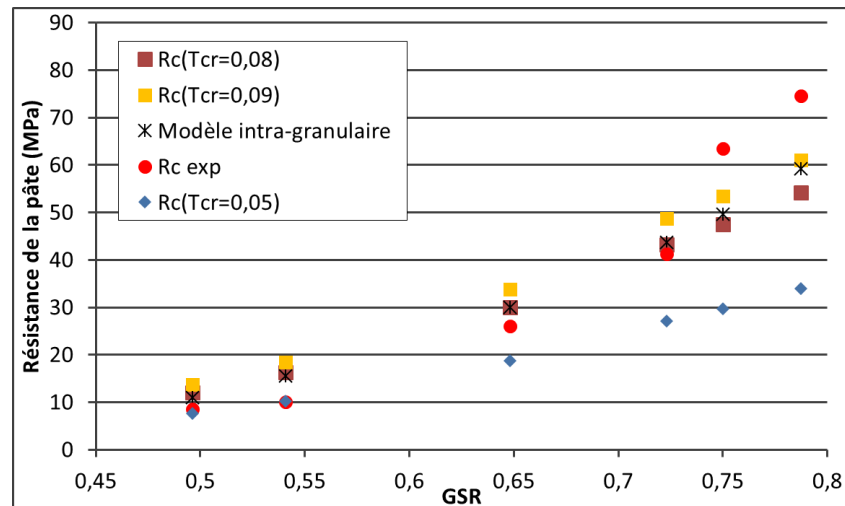
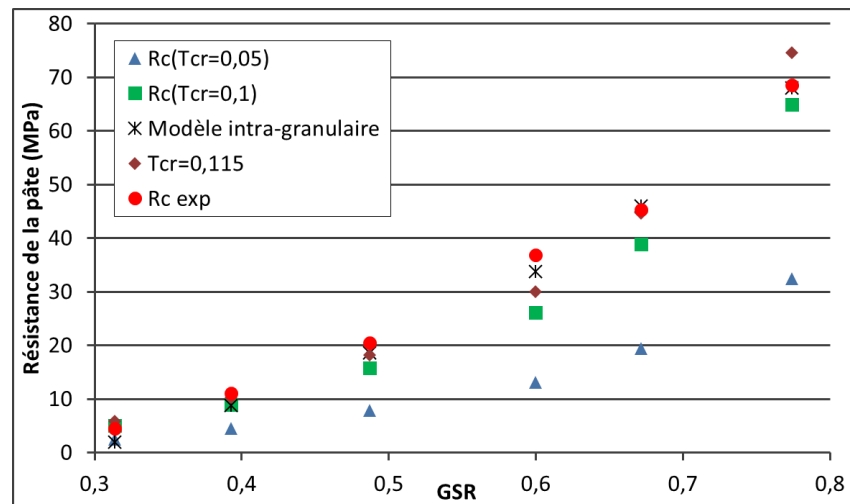
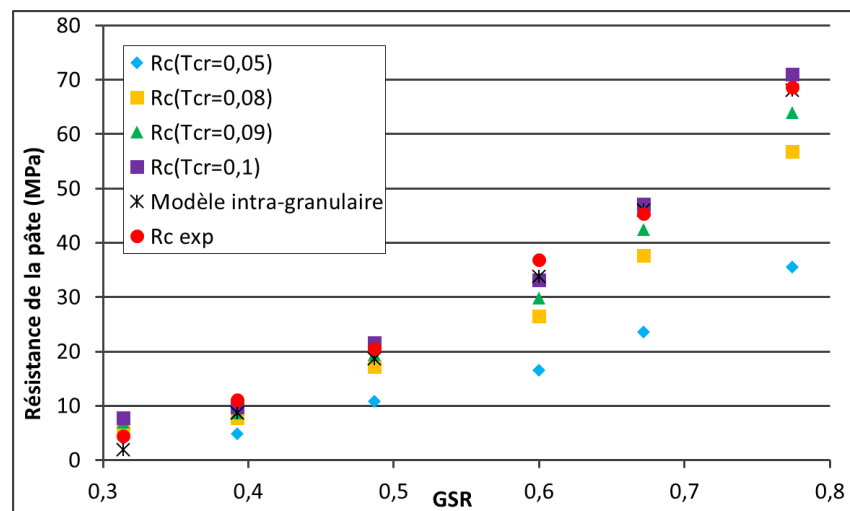
(c) $\omega=15$ (d) $\omega=60$

FIGURE 5.11 – Calage du modèle de **Mori-Tanaka** en rupture fragile sur les pâtes d'**Alite** à l'aide du paramètre T_{cr} (avec plusieurs rapports d'aspects ω) - Comparaison avec le modèle de rupture intra-granulaire

(a) $\omega=10$ (b) $\omega=12$

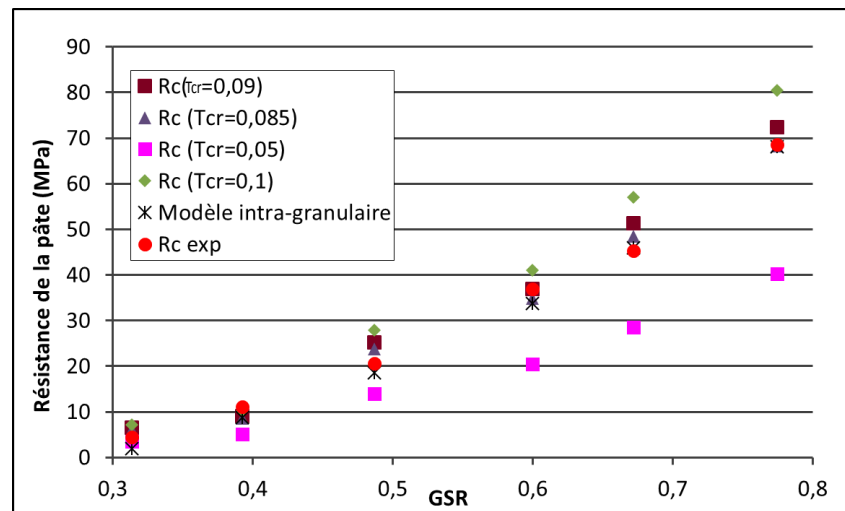
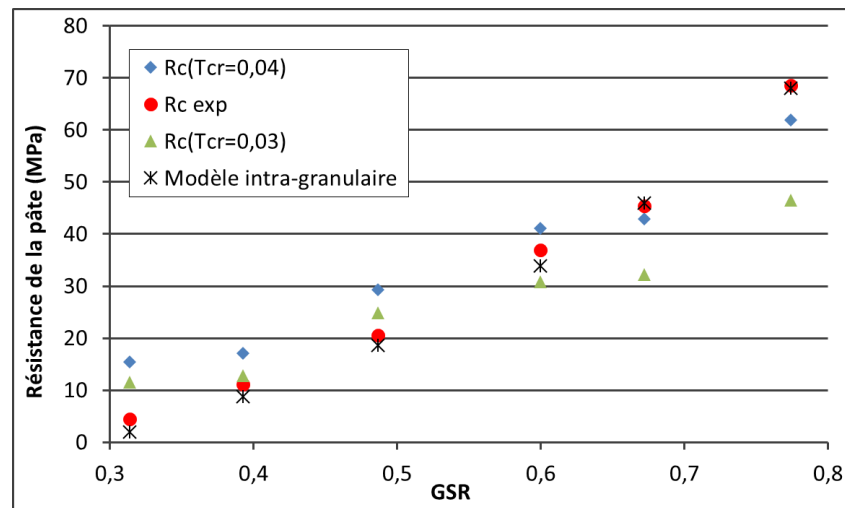
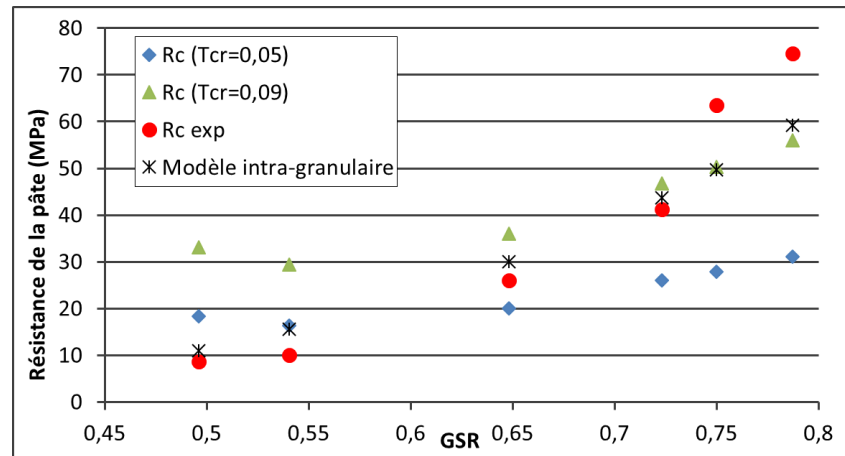
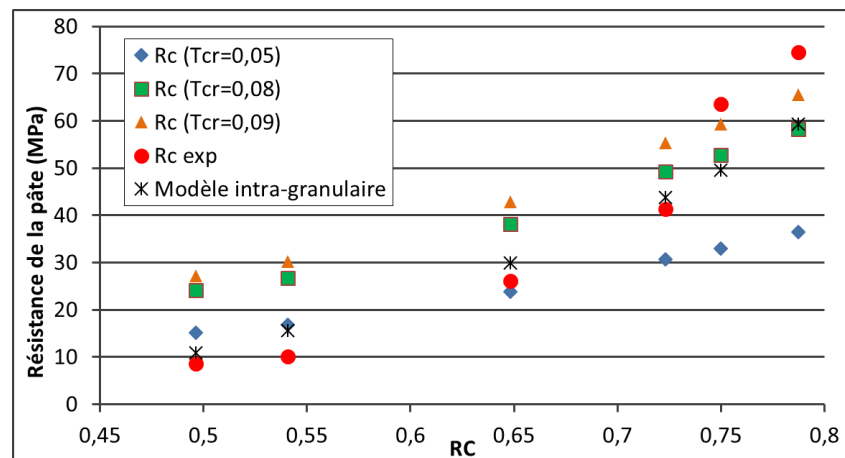
(c) $\omega=15$ (d) $\omega=60$

FIGURE 5.12 – Calage du modèle de **Mori-Tanaka** en rupture fragile sur les pâtes de **Bélite** à l'aide du paramètre T_{cr} (avec plusieurs rapports d'aspects ω) - Comparaison avec le modèle de rupture intra-granulaire

(a) $\omega=10$ (b) $\omega=12$

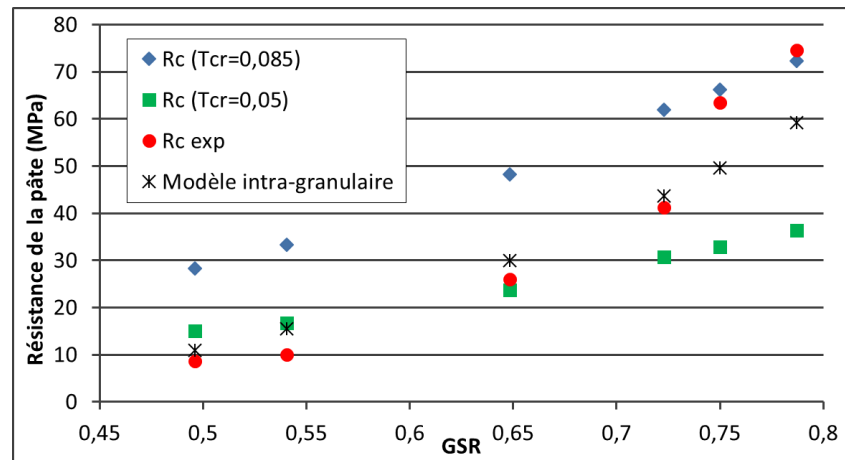
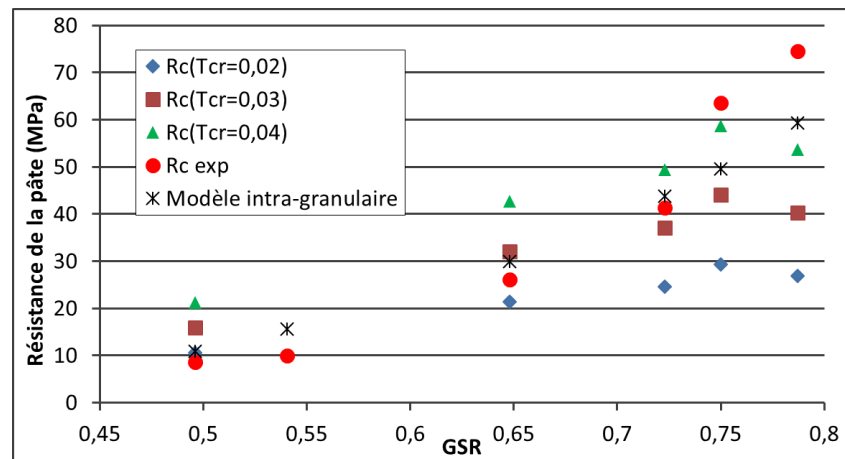
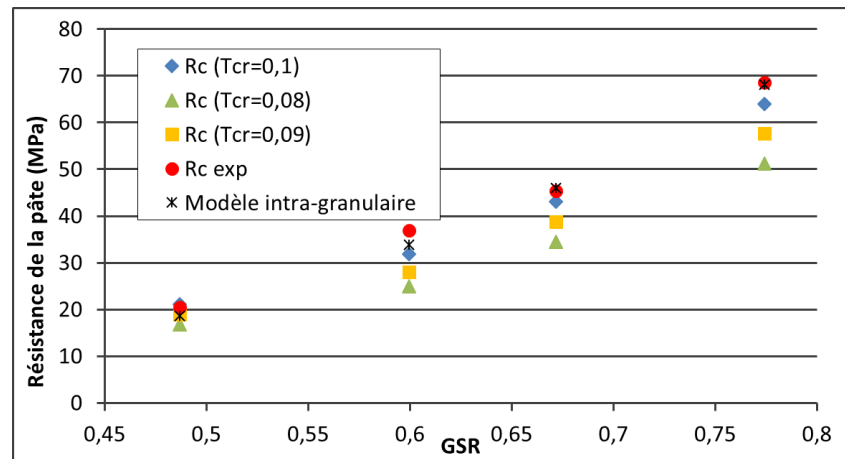
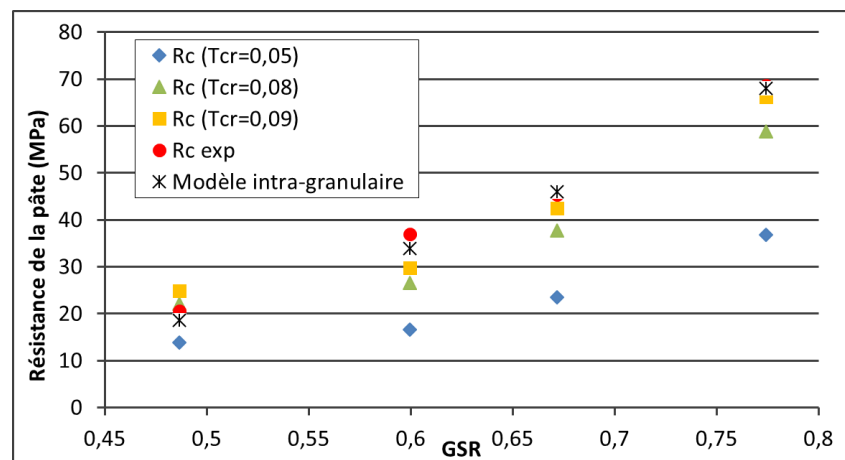
(c) $\omega=15$ (d) $\omega=60$

FIGURE 5.13 – calage du modèle **auto-cohérent** en rupture fragile sur les pâtes d'alite à l'aide du paramètre T_{cr} (avec plusieurs rapports d'aspects ω) - comparaison avec le modèle de rupture intra-granulaire

(a) $\omega=10$ (b) $\omega=12$

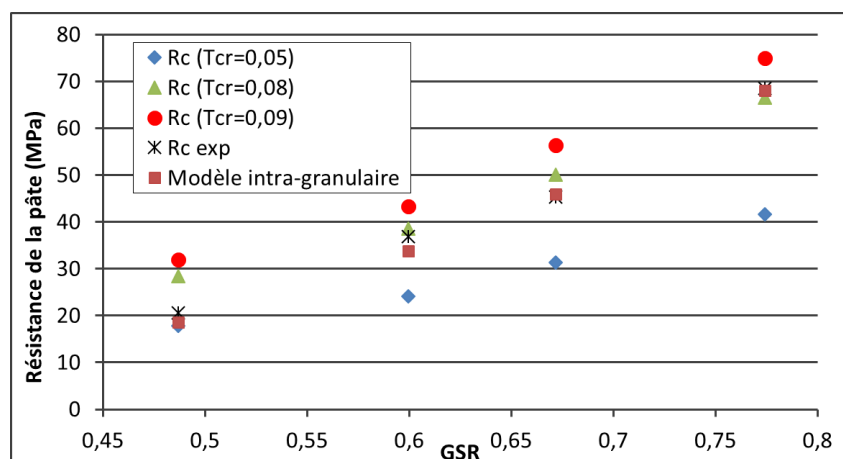
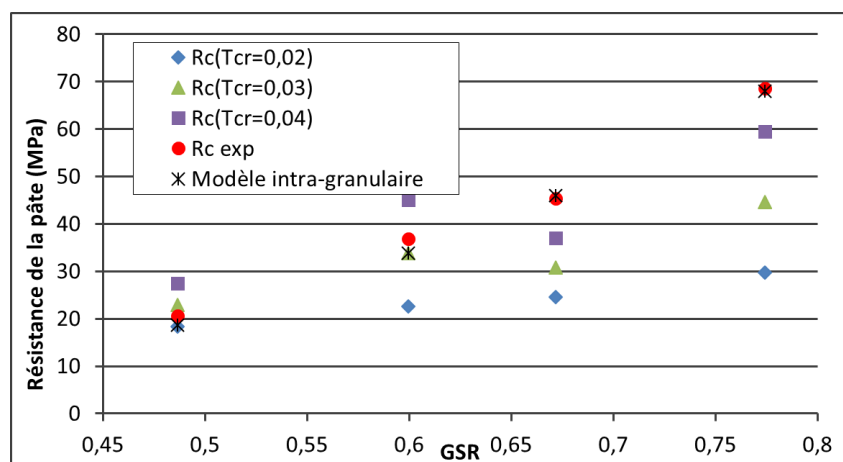
(c) $\omega=15$ (d) $\omega=60$

FIGURE 5.14 – calage du modèle **auto-cohérent** en rupture fragile sur les pâtes de **bélite** à l'aide du paramètre T_{cr} (avec plusieurs rapports d'aspects ω) - comparaison avec le modèle de rupture intra-granulaire

Validation sur les pâtes à composition plus complexe

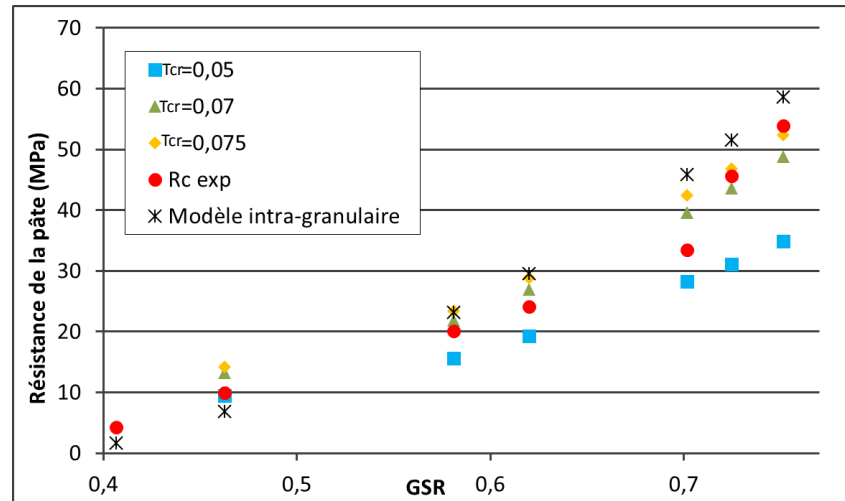
Nous nous intéressons maintenant à une gamme de pâtes à formulations plus élaborées sur laquelle nous validons les modèles de rupture fragile établis. En effet ces pâtes présentent, en plus des phases rencontrées dans les pâtes d'Alite et de Bélite, plusieurs phases d'hydrates disposées en inclusions de formes particulières (conf. Tableau 5.1). De fait, au niveau de la modélisation les schémas de Mori-Tanaka ou auto-cohérent mis en jeu

(conf. section. 5.3) nécessitent la résolution de plus de problèmes d'Eshelby (représentant chacun une inclusion d'un type hydrate plongée dans une matrice infinie). Ceci n'affecte en rien la difficulté de la modélisation. D'ailleurs les équations générales (5.4), (5.10) et (5.13) restent inchangées. Nous prendrons soin de considérer les inclusions d'hydrates d'orientation aléatoirement distribuée. En ce qui concerne les paramètres à estimer, nous nous limitons à un seul rapport d'aspect $\omega=12$. Ce rapport a donné les meilleures courbes de prédictions pour les pâtes d'Alite et de Bélite. Nous estimons le paramètre χ par la formule (5.22) ayant prouvé sa validité pour les premières pâtes. En revanche, comme aucune valeur du paramètre T_{cr} n'a pu être validée à la fois sur la pâte d'Alite et la pâte de Bélite (section 5.5.3), celui-ci est gardé comme paramètre de calage.

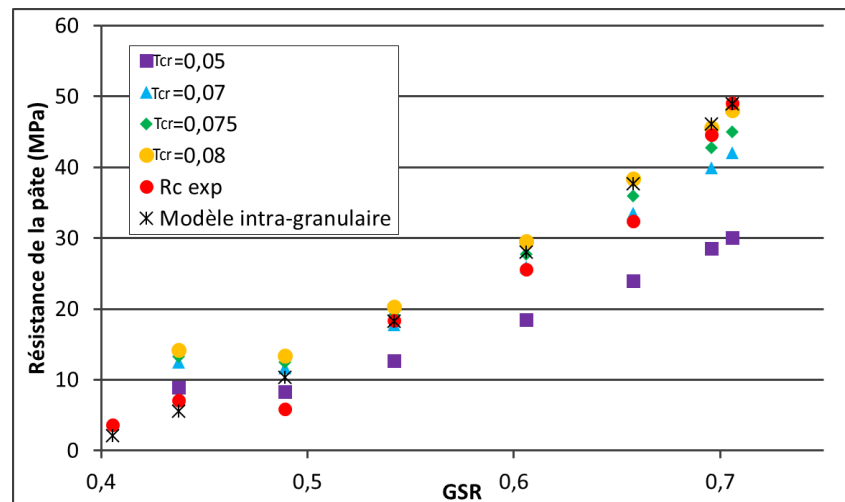
La figure 5.15 montre le calage du modèle de Mori-Tanaka en rupture fragile par le paramètre T_{cr} sur les données expérimentales ainsi que les prédictions du modèle de rupture intra-granulaire de la littérature pour chaque pâte. On y observe une très bonne concordance entre les prédictions du modèle (après calage) et les résistances expérimentales. Ces prédictions semblent plus concluantes que celles du modèle intra-granulaire de [Termkhajornkit et al., 2014], chose qu'on ne pouvait affirmer pour les pâtes d'Alite et de Bélite. De plus la valeur de calage du paramètre T_{cr} est à priori unique pour toutes les pâtes (autour de 0.075). Ceci constitue une propriété très intéressante du modèle et lui confère un champ de validité assez large. En revanche, On relève une irrégularité du modèle de Mori-Tanaka en rupture fragile pour les valeurs faibles du GSR. En effet, le modèle donne, uniquement pour ces données, des valeurs aberrantes (anormalement élevées) de la résistance prédite. Cette anomalie provient principalement des valeurs élevées de la porosité affectée au gel, associées à des GSR faibles. Ces valeurs s'approchent fortement de la porosité de percolation ce qui conduit à une rigidité estimée du gel \mathbb{C}_{gel} très faible qui entraîne une erreur sur la différentiation numérique de \mathbb{C}_{gel} (faite dans la procédure semi-numérique). En résumé, le modèle sera, à ce stade du développement, valable à partir d'une certaine valeur du GSR, correspondant à un certain écart entre la porosité considérée dans le gel et sa porosité de percolation.

Nous observons maintenant la figure 5.16 qui expose le calage du modèle auto-cohérent

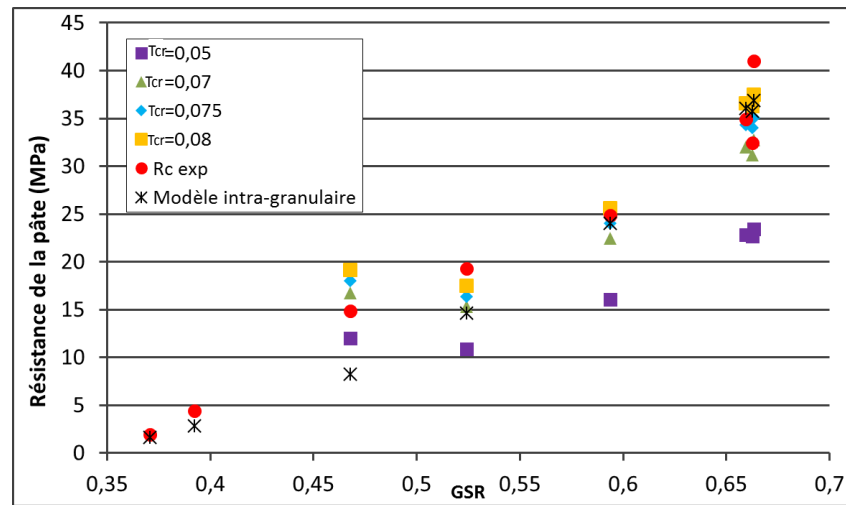
en rupture fragile. Les prédictions sont beaucoup moins probantes que le dernier modèle. Le même problème concernant la prédiction des données à GSR faible est rencontré. Le calage ne permet pas d'accorder correctement ce modèle aux résultats expérimentaux.



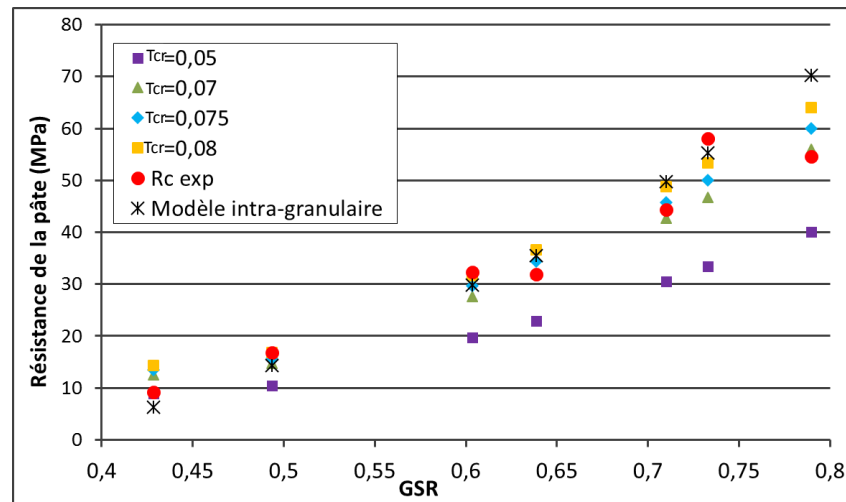
(a) pâte1



(b) pâte2

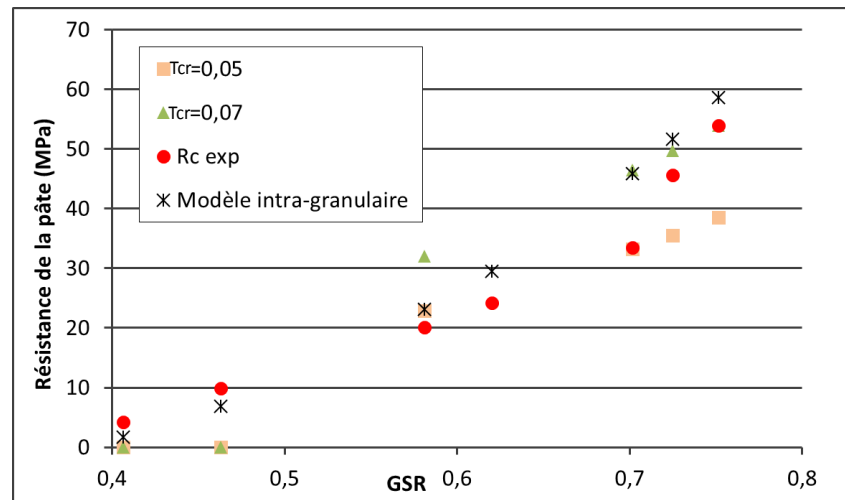


(c) pâte3

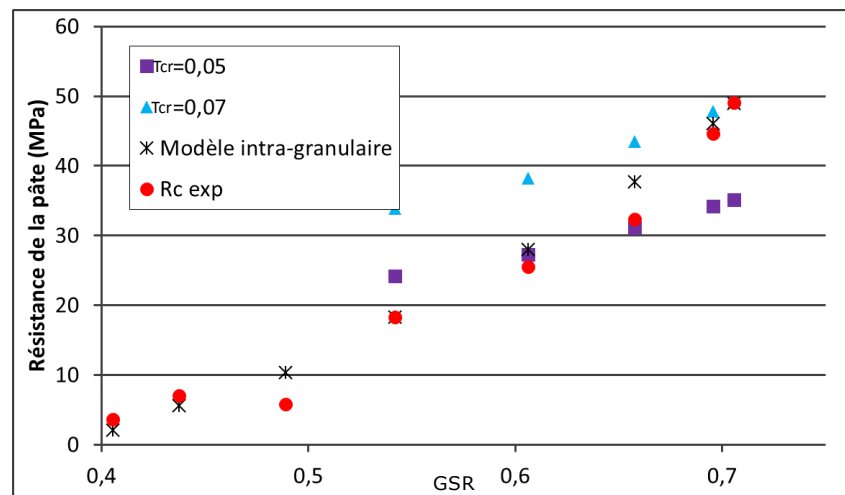


(d) pâte4

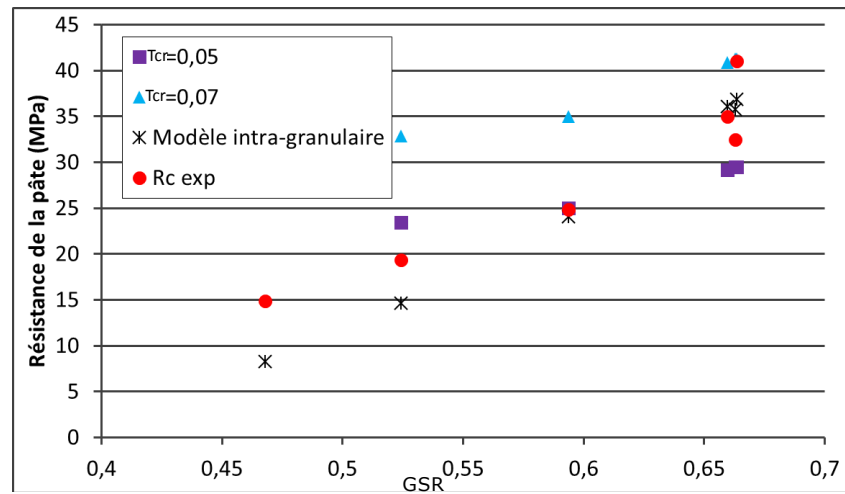
FIGURE 5.15 – Calage et validation du modèle de **Mori-Tanaka** en rupture fragile sur des pâtes à formulation plus élaborée à l'aide du paramètre T_{cr} ($\omega = 12$) - Comparaison avec le modèle de rupture intra-granulaire [Termkhajornkit et al., 2014]



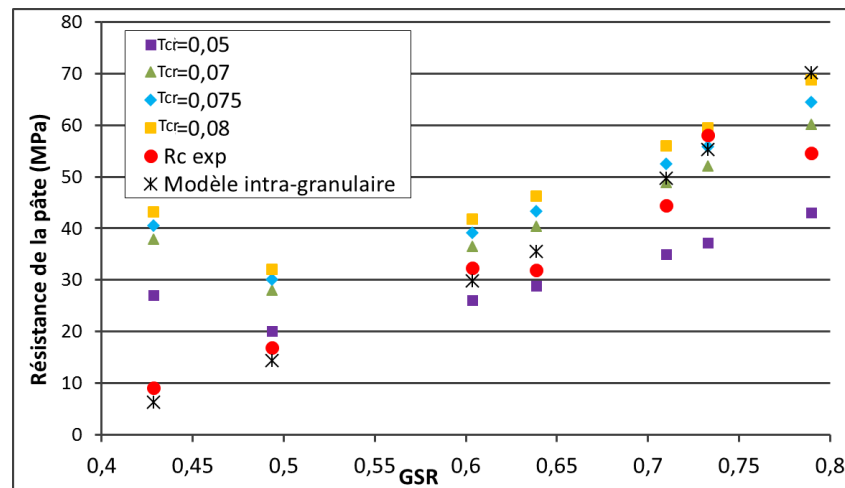
(a) pâte1



(b) pâte2



(c) pâte3

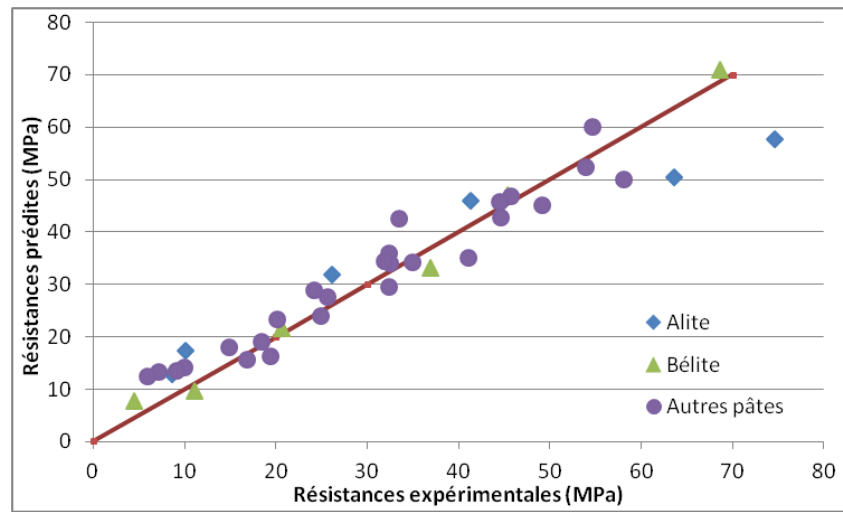


(d) pâte4

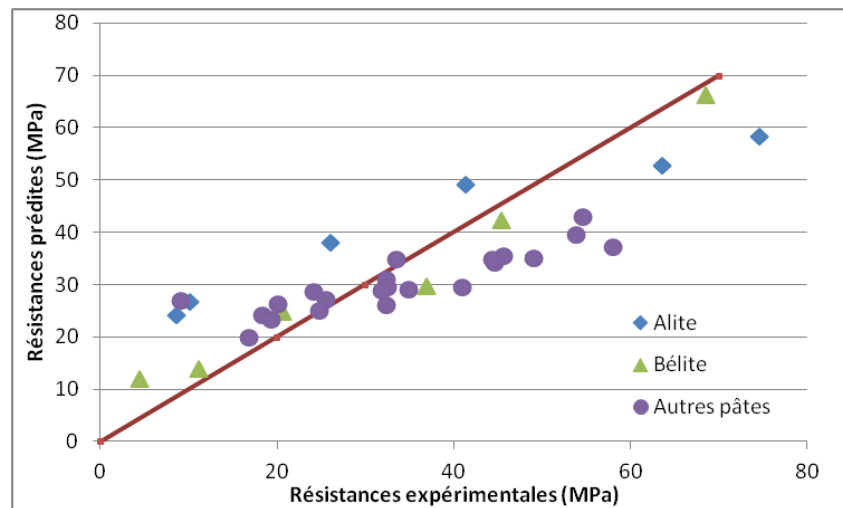
FIGURE 5.16 – Calage et validation du modèle **auto-cohérent** en rupture fragile sur des pâtes à formulation plus élaborée à l'aide du paramètre T_{cr} ($\omega = 12$) - Comparaison avec le modèle de rupture intra-granulaire [Termkhajornkit et al., 2014]

Après calage des deux modèles et détermination des meilleures valeurs du paramètre T_{cr} pour chaque type de pâte, on peut proposer une comparaison des deux modèles en terme de précision. La figure 5.17 expose les prédictions de résistances des deux modèles en fonction des résistances expérimentales, sur toutes les pâtes examinées dans ce chapitre. On observe nettement une plus grande dispersion des prédictions du modèle auto-cohérent

en rupture fragile.



(a) Mori-Tanaka



(b) Auto-cohérent

FIGURE 5.17 – Prédictions des modèles de rupture fragile en fonction des résistances expérimentales pour toutes les pâtes testées représentés avec un unique paramètre de calage $T_{cr} = 0.075$

5.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons proposé trois modèles micromécaniques pour étudier la rupture de la pâte de ciment. Ces trois modèles ont tiré partie de la modélisation en rupture du gel de C-S-H (chapitre 5.6) et se sont basés sur trois configurations microstructurales différentes pour analyser la pâte en rupture fragile ou ductile :

- Une microstructure à matrice (de gel de CSH) dans laquelle baignent des inclusions de clinker anhydre, d'hydrates (de formes différentes - cf. tableau 5.1) et éventuellement des pores capillaires. Cette microstructure a été étudiée par un schéma de **Mori-Tanaka** et examinée en supposant une **rupture fragile**.
- Une microstructure granulaire dans laquelle toutes les phases sont considérées comme inclusions y compris le gel de C-S-H. Cette microstructure a été étudiée par un schéma **auto-cohérent** et examinée également en supposant une **rupture fragile**.
- Une microstructure à matrice étudiée par un schéma de **Mori-Tanaka** comme la première mais dans laquelle toutes les inclusions sont considérées sphériques. Cette configuration a été examinée et étudiée en **rupture ductile** suivant une méthode de résolution précise qui ne pouvait s'appliquer lorsque le critère du gel de C-S-H dépendait fortement du troisième invariant. Elle n'a donc pu être validée sur les données expérimentales de formulation des pâtes qui conduisaient (suivant le modèle du chapitre) à un critère du gel de C-S-H présentant cette dépendance.

Les modèles ont été établis sous deux variantes : une variante avec porosité capillaire séparée de la porosité de gel et homogénéisée à une échelle supérieure et une variante où toute la porosité est homogénéisée à la même échelle que les grains de C-S-H. Nous avons cherché ensuite à valider les deux variantes de chaque modèle (de rupture fragile) sur des données expérimentales collectées dans un travail de [Termkhajornkit et al., 2014]. Ces données avaient servi à valider un modèle de rupture de pâte engendrée par une rupture intra-granulaire dans le gel. Elles comprenaient les résistances à la compression

expérimentales de deux types de pâtes à formulations simples (Alite et Bélite) et quatre autres types de pâte à formulations plus élaborées. Les variantes à porosités séparées ne pouvaient donner la tendance des résultats expérimentaux à cause de la porosité de gel constante dans les données ce qui nous obligeait à garder une valeur constante du paramètre χ (rapport des surfaces de contact sur surfaces totales de grains dans le gel), paramètre déterminant de la tendance des prédictions par des modèles. Pour les variantes à porosité totale dans le gel, la confrontation avec les résultats expérimentaux des pâtes d'Alite et Bélite a permis :

- de trouver pour chaque type de pâte, une valeur optimale du paramètre T_{cr} (limite du critère dans les interfaces) par calage.
- de vérifier la validité d'une formule théorique choisie pour estimer le deuxième paramètre χ .
- de déterminer le meilleur ordre du rapport d'aspect des grains de C-S-H.

Ces résultats nous ont conduit à valider sur les données des pâtes à formulations plus élaborées en retenant le rapport d'aspect donnant les meilleures prédictions, ainsi que la formule théorique de χ validée. Le paramètre T_{cr} a été gardé comme paramètre de calage, puisque des valeurs différentes ont été obtenues pour l'Alite et la Bélite. Le modèle de Mori-Tanaka en rupture fragile a donné une bonne concordance autant avec les données des deux premières pâtes (Alite et Bélite) qu'avec celles des deuxièmes dont la formulation s'approchait le plus des pâtes commerciales. Une valeur unique de T_{cr} a même pu être obtenue par calage pour ces dernières formulations laissant supposer un champ d'application assez général de ce modèle. Une comparaison avec le modèle de rupture intra-granulaire de [Termkhajornkit et al., 2014] a permis de rendre compte de la bonne précision de notre modèle par rapport aux modèles récents de la littérature. En revanche, le modèle auto-cohérent en rupture fragile n'a pas donné de résultats concluants, hormis ceux relatifs à la Bélite où les prédictions semblent être plus au moins correctes. Ce deuxième modèle qui n'a pas pu être bien calé sur les pâtes d'Alite ou sur les deuxième pâtes, laisse penser à une microstructure de la pâte de ciment ne se prêtant pas à une modélisation en matériau granulaire à cette échelle.

* *

*

Conclusions et perspectives

Il a été bien établi, dans cette étude, que les interfaces et les formes des inclusions ont un effet significatif sur les propriétés élastiques, poroélastiques et de rupture des matériaux composites. La prise en compte de ces effets dans les modèles micromécaniques améliore sensiblement leur aptitude prévisionnelle. Les interfaces proprement dites peuvent produire des discontinuités locales du vecteur contrainte ou du déplacement aux bords des inclusions.

La prise en compte de l'effet de discontinuité du vecteur contrainte produite par le premier type d'interface à travers un modèle, inspiré de la solution d'Eshelby [Eshelby, 1957] et développé dans le cadre de cette étude (Chapitre2), a permis de rendre compte de l'effet renforçant de ce type d'interface sur les propriétés élastiques effectives du matériau ayant une microstructure granulaire à inclusions sphériques. L'effet sur les propriétés poroélastiques a également été présenté. L'étude de la solution élastique donnée par ce modèle nous a amené à déterminer des expressions approchées des modules effectifs du matériau pour les faibles et grandes valeurs du module d'interface.

La prise en compte de l'effet d'une discontinuité locale de déplacement, produite par le deuxième type d'interface, pour des inclusions ellipsoïdales a été abordée par des approches énergétiques permettant de définir des inclusions équivalentes qui ont été exploités dans un schéma d'homogénéisation (Chapitre3), pour estimer les modules élastiques effectifs d'un matériau granulaire poreux à inclusions élancées. Il a été établi que ces effets d'interface affaiblissaient les propriétés élastiques du composite. Leur considération pour des inclusions ellipsoïdales constitue une extension aux modèles élastiques établis dans la

littérature.

L'effet de ce deuxième type d'interface sur les propriétés de rupture des matériaux composites a été établi, en admettant un critère de rupture dans les interfaces (de Von Mises par exemple) et en utilisant une approche de changement d'échelle. Le critère de rupture homogénéisé du matériau granulaire à inclusions élançées a été établi sur la base des résultats relatifs aux propriétés élastiques effectives obtenues dans le chapitre 3. Cette approche a permis d'enrichir les acquis de la littérature dans le sens où elle permet d'examiner un mode de rupture inter-granulaire (entre les grains) d'une microstructure à inclusions ellipsoïdales, mode de rupture considéré jusque là uniquement avec des inclusions sphériques. La difficulté technique découlant de la forme ellipsoïdale des inclusions a été de gérer une rupture locale se produisant de manière anisotrope dans le matériau granulaire. Le critère homogénéisé de ce matériau a montré une dépendance au troisième invariant de la contrainte que nous nous sommes efforcés de caractériser en utilisant une méthode de calcul originale (basée sur le schéma dilué). La microstructure granulaire poreuse à inclusions élançées étudiée en élasticité et en rupture s'apparentait bien à celle du gel de C-S-H, hydrate principal et phase dominante dans les pâtes de ciment durcies. En utilisant un deuxième changement d'échelle, nous avons pu remonter aux propriétés de rupture de la pâte à partir de celles du gel. Ce changement d'échelle a été mené de trois manières différentes selon la mesostructure considérée pour la pâte et la nature de la rupture (fragile ou ductile). Les trois modèles de rupture en découlant ont permis de donner des critères homogénéisés de rupture différents de la pâte. Deux de ces modèles ont été confrontés à des résultats expérimentaux de résistance à la compression des pâtes. L'un d'entre eux a montré une très bonne concordance avec l'expérience. Sa précision s'est avérée comparable à celle d'un modèle de la littérature [Termkhajornkit et al., 2014] basé sur une rupture intra-granulaire du gel de C-S-H (contrairement à la rupture inter-granulaire qu'on admettait pour le gel). Le modèle de rupture de la pâte de ciment établi dans ce travail et tenant compte de la rupture inter-granulaire du gel de C-S-H représente un outil de prévision des résistances des pâtes exploitable par les professionnels des matériaux de construction. Il peut être calibré pour donner de meilleures prédictions pour un type

particulier de pâte. Il peut également servir à optimiser la formulation des pâtes pour obtenir de meilleures résistances en évitant de réaliser un grand nombre d'essais.

En perspectives à ce travail, et pour palier aux carences de la littérature scientifique en matière d'effets d'interface de discontinuité de vecteur contrainte, il serait intéressant de développer des modèles d'élasticité considérant ces effets dans des matériaux à inclusions ellipsoïdales ainsi que des modèles de rupture ductile et fragile due à des mécanismes d'interface. Pour le deuxième type, nous proposons de développer davantage les méthodes énergétiques définissant des inclusions équivalentes pour en améliorer la précision. Nous suggérons aussi d'améliorer les méthodes utilisées dans les modèles de rupture et de les généraliser à tous les cas de chargement possibles (à l'image de la méthode diluée) pour déterminer des représentations en 3D précises des critères homogénéisés.

* * *

Annexe A

Expressions analytiques obtenues dans le chapitre 1

A.1 Coefficients de l'équation déviatorique (2.59)

$$\begin{aligned} A &= 16(1 - 2\nu_0)(7 - 10\nu_0)(1 + \nu)(\nu - 1)^2 \\ B &= 2(\nu - 1)(\{[(-140 + 120f)\nu - 120f - 60]\nu_0^2 + [(-144f + 168)\nu + 144f + 72]\nu_0 \\ &\quad + (-49 + 42f)\nu - 42f - 21\}\kappa + [(-240 + 420f)\nu^2 - 420f + 240]\nu_0^2 \\ &\quad + [(-474f + 156)\nu^2 - 156 + 474f]\nu_0 + 126f\nu^2 - 126f) \\ C &= \frac{1}{2}(\{[(-240f + 160)\nu - 40 + 240f]\nu_0^2 + [(-192 + 288f)\nu + 48 - 288f]\nu_0 \\ &\quad + (56 - 84f)\nu - 14 + 84f\}\kappa^2 + \{[(570 - 1080f)\nu^2 + (-104 + 240f)\nu + 840f - 466]\nu_0^2 \\ &\quad + [(960f - 399)\nu^2 + (384f - 156)\nu + 555 - 1344f]\nu_0 + (21 - 168f)\nu^2 \\ &\quad + (140 - 336f)\nu + 504f - 161\}\kappa + [(350 - 690f)\nu^3 + (690f - 350)\nu^2 \\ &\quad + (690f - 350)\nu + 350 - 690f]\nu_0^2 + [(-348f + 216)\nu^3 + (-216 + 348f)\nu^2 + (-216 + 348f)\nu \\ &\quad - 348f + 216]\nu_0 + (-182 + 462f)\nu^3 + (182 - 462f)\nu^2 + (182 - 462f)\nu - 182 + 462f) \\ D &= \frac{3}{8}\{(10\nu_0 - 7)\kappa^2 + [(45\nu_0 - 21)\nu + 49(\nu_0 - 1)]\kappa + 20\nu_0(\nu^2 - 1) \\ &\quad + 28(\nu^2 - 1)\}\{(2\nu_0 - 1)\kappa + 2(\nu_0 + 1)(\nu - 1)\}(2f - 1) \end{aligned} \tag{A.1}$$

A.2 Comportement de la solution pour les grandes valeurs de κ - Coefficients de l'équation 2.62

$$\begin{aligned}
a &= \frac{1}{16} \frac{6f(\nu - 1) + Ra - 5\nu - 1}{1 - \nu^2} \\
b &= -\frac{1}{4} [(210f - 120)\nu_0^2 + (78 - 237f)\nu_0 + 63f] Ra^2 \\
&+ \{ [(-1380f + 2520f^2 + 60)\nu - 2520f^2 + 2700f - 692]\nu_0^2 \\
&+ [(18 + 1386f - 2844f^2)\nu - 3150f + 954 + 2844f^2]\nu_0 + (756f^2 - 42 - 294f)\nu \\
&- 322 + 882f - 756f^2 \} Ra + [(-3960f^2 + 7560f^3 + 90f + 60)\nu^2 \\
&+ (15840f^2 + 88 - 15120f^3 - 3948f)\nu - 11880f^2 + 7560f^3 + 6426f - 1060]\nu_0^2 \\
&+ [(5508f^2 - 96 - 8532f^3 - 105f)\nu^2 + (17064f^3 - 21600f^2 + 7374f + 48)\nu \\
&- 8532f^3 + 16092f^2 + 2640 - 10617f]\nu_0 + (-21f + 2268f^3 - 1764f^2 + 42)\nu^2 \\
&+ (-4536f^3 - 28 - 3066f + 7056f^2)\nu - 1190 + 4011f + 2268f^3 - 5292f^2) \\
&/ ((2\nu_0 - 1)(10\nu_0 - 7) \{ 3Ra^2 + [12f(\nu - 1) - 2\nu + 6]Ra \\
&+ (12f - 36f^2 - 1)\nu^2 + (-48f - 10 + 72f^2)\nu - 36f^2 + 36f - 25 \})
\end{aligned}$$

avec

$$Ra = \sqrt{4(900f^2 - 2220f + 8281)\nu^2 + 4(5604f - 10465 - 3060f^2)\nu + 204f(-61 + 51f) + 13225} \quad (\text{A.2})$$

Bibliographie

- [Abrams, 1919] Abrams, D. A. (1919). *Design of Concrete Mixtures*. Structural Materials Research Laboratory.
- [Bernard et al., 2003] Bernard, O., Ulm, F.-J., and Lemarchand, E. (2003). A multiscale micromechanics-hydration model for the early-age elastic properties of cement-based materials. *Cement and Concrete Research*, 33(9) :1293–1309.
- [Biot, 1941] Biot, M. (1941). General theory of threedimensional consolidation. *J. Appl. Phys.*, 12 :155–164.
- [Bolomey, 1935] Bolomey, J. (1935). Granulation et prévision de la résistance probable des bétons. *Travaux*, 30 :228–232.
- [Brisard, 2011] Brisard, S. (2011). *Analyse morphologique et homogénéisation numérique*. PhD thesis, Paris-Est.
- [Brisard et al., 2010a] Brisard, S., Dormieux, L., and Kondo, D. (2010a). Hashinshtrikmann bounds on the bulck modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects. *Comp. Mater. Sci.*, 48 :589–596.
- [Brisard et al., 2010b] Brisard, S., Dormieux, L., and Kondo, D. (2010b). Hashinshtrikmann bounds on the shear modulus of a nanocomposite with spherical inclusions and interface effects. *Comp. Mater. Sci.*, 50 :403–410.
- [Brochard et al., 2012] Brochard, L., Vandamme, M., and Pellenq, R.-M. (2012). Poro-mechanics of microporous media. *J. Mech. Phys. Sol.*, 60 :606–622.

- [Castañeda, 2005] Castañeda, P. P. (2005). *Heterogeneous Materials : Majeure de Mécanique, Option Matériaux Et Structures*. École polytechnique, Département de mécanique.
- [Christensen and Lo, 1979] Christensen, R. and Lo, K. H. (1979). Solutions for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models. *J. Mech. Phys. Solids*, 27 :315–330.
- [Coussy, 1995] Coussy, O. (1995). *Mechanics of Porous Continua*. Wiley, New York.
- [Cuenot et al., 2004] Cuenot, S., Frétiigny, C., Demoustier-Champagne, S., and Nysten, B. (2004). Surface tension effect on the mechanical properties of nanomaterials measured by atomic force microscopy. *Physical Review B*, 69(16) :165410.
- [de Larrard, 1999] de Larrard, F. (1999). *Concrete mixture proportionning- A scientific Approach*. Modern Concrete Technologie Series.
- [Dingreville et al., 2005] Dingreville, R., Qu, J., and Cherkaoui, M. (2005). Surface free energy and its effect on the elastic behavior of nano-sized particles, wires and films. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53(8) :1827–1854.
- [Dormieux et al., 2010] Dormieux, L., Jeannin, L., Bermer, E., Lee, T. H., and Sanahuja, J. (2010). Micromechanical models of the strength of a sandstone. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 34 :249–271.
- [Dormieux and Kondo, 2010] Dormieux, L. and Kondo, D. (2010). An extension of gurson model incorporating interface stresses effects. *International Journal of Engineering Science*, 48(6) :575–581.
- [Dormieux et al., 2006] Dormieux, L., Kondo, D., and Ulm, F. J. (2006). *Microporomechanics*. John Wiley, England.
- [Dormieux et al., 2007] Dormieux, L., Sanahuja, J., and Maalej, Y. (2007). Resistance d’un polycristal avec interfaces intergranulaires imparfaites. *C. R. Mecanique*, 335 :25–31.

- [Duan et al., 2005a] Duan, H., Wang, J., Huang, Z., and Karihaloo, B. (2005a). Size-dependent effective elastic constants of solids containing nano-inhomogeneities with interface stress. *J. Mech. Phys.*, 53 :1574–1596.
- [Duan et al., 2005b] Duan, H., Wang, J.-x., Huang, Z., and Zhong, Y. (2005b). Stress fields of a spheroidal inhomogeneity with an interphase in an infinite medium under remote loadings. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Science*, 461(2056) :1055–1080.
- [Duan et al., 2007a] Duan, H. L., Yi, X., Huang, Z., and Wang, J. (2007a). A unified scheme for prediction of effective moduli of multiphase composites with interface effects. part i : Theoretical framework. *Mech. Mat.*, 39 :81–93.
- [Duan et al., 2007b] Duan, H. L., Yi, X., Huang, Z., and Wang, J. (2007b). A unified scheme for prediction of effective moduli of multiphase composites with interface effects. part ii : Application and scaling laws. *Mech. Mat.*, 39 :94–103.
- [Eshelby, 1957] Eshelby, J. (1957). The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proc. R. Society A*, 241 :376–396.
- [Feldman and Beaudoin, 1976] Feldman, R. F. and Beaudoin, J. J. (1976). Microstructure and strength of hydrated cement. *Cement and Concrete Research*, 6(3) :389–400.
- [Féret, 1892] Féret, M. R. (1892). *Sur la compacité des mortiers hydrauliques*. Vve C. Dunod.
- [Gurtin and Murdoch, 1975] Gurtin, M. and Murdoch, A. (1975). A continuum theory of elastic material surfaces. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 57 :291–323.
- [Haigh, 1920] Haigh, B. (1920). The strain energy function and the elastic limit. *Engineering*, 109 :158–160.
- [Hashin, 1962] Hashin, Z. (1962). The elastic moduli of heterogeneous materials. *Journal of Applied Mechanics*, 29(1) :143–150.
- [Hashin, 1991] Hashin, Z. (1991). Thermoelastic properties of particulate composites with imperfect interface. *J. Mech. Phys. Solids*, 39 :745–762.

- [Hashin and Shtrikman, 1962] Hashin, Z. and Shtrikman, S. (1962). On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 10(4) :335–342.
- [He et al., 2012] He, Z., Dormieux, L., Lemarchand, E., and Kondo, D. (2012). A poroelastic model for the effective behavior of granular materials with interface effects. *Mechanics Research Communications*, 43 :41–45.
- [Hervé and Zaoui, 1990] Hervé, E. and Zaoui, A. (1990). Modelling the effective behavior of nonlinear matrix-inclusion composites. *European journal of mechanics. A. Solids*, 9(6) :505–515.
- [Herve and Zaoui, 1993] Herve, E. and Zaoui, A. (1993). n-layered inclusion-based micromechanical modelling. *Eng. Sci.*, 31(1) :1–10.
- [Huang et al., 1993] Huang, J. H., Furuhashi, R., and Mura, T. (1993). Frictional sliding inclusions. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 41(2) :247–265.
- [Kroener, 1978] Kroener, E. (1978). Self-consistent scheme and graded disorder in polycrystal elasticity. *J. Phys. F : Met. Phys.*, 8 :2261–2267.
- [Leblond et al., 1994] Leblond, J., Perrin, G., and Suquet, P. (1994). Exact results and approximate models for porous viscoplastic solids. *International Journal of Plasticity*, 10(3) :213–235.
- [Lemarchand, 2001] Lemarchand, E. (2001). *Contribution de la micromécanique à l'étude des phénomènes de transport et de couplage poromécanique dans les milieux poreux : Application aux phénomènes de gonflement des géomatériaux*. PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.
- [Li et al., 2004] Li, S., Yiming, W., Zhuping, H., and Jianxiang, W. (2004). Interface effect on the effective bulk modulus of a particle-reinforced composite. *Acta Mechanica Sinica*, 20(6) :676–679.
- [Locher and Richartz, 1976] Locher, F. W. and Richartz, W. (1976). Setting of cement : I, reaction and development of structure. *Zem.-Kalk-Gips*, 29(10) :435–42.

- [Lode, 1926] Lode, W. (1926). Versuche über den einfluß der mittleren hauptspannung auf das fließen der metalle eisen, kupfer und nickel. *Zeitschrift für Physik*, 36(11-12) :913–939.
- [Love, 1944] Love, A. E. H. (1944). *A Treatise on the mathematical theory of elasticity (4th edition)*. Dover.
- [Maalej et al., 2009] Maalej, Y., Dormieux, L., and Sanahuja, J. (2009). Micromechanical approach to the failure criterion of granular media. *European Journal of Mechanics A/ Solids*, 28 :647–653.
- [Mori and Tanaka, 1973] Mori, T. and Tanaka, K. (1973). Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta metallurgica*, 21(5) :571–574.
- [Müller and Saúl, 2004] Müller, P. and Saúl, A. (2004). Elastic effects on surface physics. *Surface Science Reports*, 54(5) :157–258.
- [Mura and Furuhashi, 1984] Mura, T. and Furuhashi, R. (1984). The elastic inclusion with a sliding interface. *J. App. Mech.*, 51 :308–310.
- [Nguyen, 2012] Nguyen, M. T. (2012). *Caractérisation géomécanique de la dégradation des roches sous l’effet de l’injection de gaz acides*. PhD thesis, Université Paris-Est.
- [Nix and Gao, 1998] Nix, W. D. and Gao, H. (1998). An atomistic interpretation of interface stress. *Scripta Materialia*, 39(12) :1653–1661.
- [Pichler et al., 2013] Pichler, B., Hellmich, C., Eberhardsteiner, J., Wasserbauer, J., Termkhajornkit, P., Barbarulo, R., and Chanvillard, G. (2013). Effect of gel-space ratio and microstructure on strength of hydrating cementitious materials : an engineering micromechanics approach. *Cement and Concrete Research*, 45 :55–68.
- [Pierard et al., 2007a] Pierard, O., Gonzalez, C., Segurado, J., LLorca, J., and Doghri, I. (2007a). Micromechanics of elasto-plastic materials reinforced with ellipsoidal inclusions. *International Journal of Solids and Structures*, 44(21) :6945–6962.
- [Pierard et al., 2007b] Pierard, O., LLorca, J., Segurado, J., and Doghri, I. (2007b). Micromechanics of particle-reinforced elasto-viscoplastic composites : finite element simu-

- lations versus affine homogenization. *International Journal of Plasticity*, 23(6) :1041–1060.
- [Powers and Brownnyard, 1946] Powers, T. C. and Brownnyard, T. L. (1946). Studies of the physical properties of hardened portland cement paste. In *ACI Journal Proceedings*, volume 43. ACI.
- [Quang and He, 2007] Quang, H. L. and He, Q.-C. (2007). Size dependent effective thermoelastic properties of nanocomposites with spherically anisotropic phases. *J. Mech. Phys. Solids*, 55 :1889–1921.
- [Quang and He, 2008] Quang, H. L. and He, Q.-C. (2008). Variational principle and bounds for elastic inhomogeneous materials with coherent imperfect interphases. *Mech. mater.*, 40 :865–884.
- [Richardson, 1999] Richardson, I. G. (1999). The nature of c-s-h in hardened cements. *Cement and Concrete Research*, 29 :1131–1147.
- [Robinet et al., 2012] Robinet, J., Iven, B., Coello, D., and Talandier, J. (2012). Les distributions de taille de pores dans les argilites du callovo-oxfordien de l’est de la france. In *Colloque Transfert*, Lille.
- [Sanahuja, 2008] Sanahuja, J. (2008). *Impact de la morphologie structurale sur les performances mécaniques des matériaux de construction : Application au plâtre et à la pâte de ciment*. PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.
- [Sanahuja and Dormieux, 2005] Sanahuja, J. and Dormieux, L. (2005). Résistance d’un milieu poreux à phase solide hétérogène. *Comptes Rendus Mécanique*, 333(11) :818–823.
- [Sanahuja et al., 2008] Sanahuja, J., Dormieux, L., and Chanvillard, G. (2008). A reply to the discussion “does c-s-h particle shape matter?” f.-j. ulm and h. jennings of the paper “modelling elasticity of a hydrating cement paste”, ccr 37 (2007). *Cement and Concrete Research*, 38(8) :1130–1134.

- [Sanahuja et al., 2007] Sanahuja, J., Dormieux, L., and Maghous, S. (2007). Influence of capillary effects on strength of non-saturated porous media. *C. R. Mecanique*, 334 :19–24.
- [Shenoy, 2005] Shenoy, V. (2005). Atomistic calculations of elastic properties of metallic fcc crystal surfaces. *Phys. Review B*, 71 :094104–1–094104–11.
- [Shiotz et al., 1998] Shiotz, J., Tolla, F. D., and Jacobsen, K. (1998). Softening of nanocrystalline metals at very small grain size. *Nature*, 391 :561–563.
- [Shuttleworth, 1950] Shuttleworth, R. (1950). The surface tension of solid. *Proc. Phys. Soc.*, A 63 :444–457.
- [Taylor et al., 2010] Taylor, R., Richardson, I., and Brydson, R. (2010). Composition and microstructure of 20-year-old ordinary portland cement–ground granulated blast-furnace slag blends containing 0 to 100% slag. *Cement and Concrete Research*, 40(7) :971–983.
- [Termkhajornkit et al., 2014] Termkhajornkit, P., Vu, Q. H., Barbarulo, R., Daronnat, S., and Chanvillard, G. (2014). Dependence of compressive strength on phase assemblage in cement pastes : Beyond gel-space ratio - experimental evidence and micromechanical modeling. *Cement and Concrete Research*, 56 :1–11.
- [Theocaris, 1987] Theocaris, P. S. (1987). *The Mesophase Concept in Composites*. Springer-Verlag.
- [Ulm and Jennings, 2008] Ulm, F.-J. and Jennings, H. M. (2008). Does c–s–h particle shape matter ? a discussion of the paper ‘modelling elasticity of a hydrating cement paste’, by julien sanahuja, luc dormieux and gilles chanvillard. *ccr* 37 (2007) 1427–1439. *Cement and Concrete Research*, 38(8) :1126–1129.
- [Wang et al., 2006] Wang, J., Duan, H., Huang, Z., and Karimloo, B. (2006). A scaling law for properties of nano-structured materials. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Science*, 462(2069) :1355–1363.

- [Wang et al., 2005] Wang, J., Duan, H., Zhang, Z., and Huang, Z. (2005). An anti-interpenetration model and connections between interphase and interface models in particle-reinforced composites. *Int. J. of Mech. Sciences*, 47 :701–718.
- [Wei and Amnand, 2004] Wei, Y. and Amnand, L. (2004). Grain-boundary sliding and separation in polycrystalline metals : application to nanocrystalline fcc metals. *J. Mech. Phys. Solids*, 52 :2587–2616.
- [Westergaard, 1920] Westergaard, H. M. (1920). On the resistance of ductile materials to combined stresses in two or three directions perpendicular to one another. *Journal of the Franklin Institute*, 189(5) :627–640.